

# Klassische und Quantendynamik periodisch getriebener, chaotischer Streusysteme

D I S S E R T A T I O N

zur Erlangung des akademischen Grades

**Doctor rerum naturalium**  
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt

der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften  
der Technischen Universität Dresden

von

Michael Henseler  
geboren am 3. Mai 1969 in Stuttgart

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR PHYSIK KOMPLEXER SYSTEME, DRESDEN  
1999

Gutachter: Prof. Dr. Peter Fulde  
Prof. Dr. Ingrid Rotter  
Prof. Dr. Peter Hänggi

Eingereicht am: 12.05.1999

Tag der Verteidigung: 23.07.1999

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Theorie zeitperiodischer Streusysteme</b>	<b>11</b>
2.1	Klassische Beschreibung . . . . .	12
2.1.1	Klassifizierung der Dynamik . . . . .	15
2.1.2	Systeme mit zeitperiodischem Antrieb in einem räumlich begrenzten Gebiet . . . . .	18
2.1.3	Systeme mit wechselstromartigem Antrieb . . . . .	20
2.1.4	Klassisches Analogon der Kramers-Henneberger- Transformation . . . . .	21
2.2	Quantenmechanische Beschreibung . . . . .	26
2.2.1	Transport in mesoskopischen Systemen und Streutheorie	28
2.2.2	Streutheorie für zeitperiodische Potentiale . . . . .	31
2.2.3	Eindimensionale zeitperiodische Streusysteme . . . . .	46
2.2.4	Die $(t, t')$ -Methode zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators . . . . .	51
2.2.5	Kramers-Henneberger-Transformation . . . . .	57
2.2.6	Numerische Behandlung eindimensionaler zeitperiodischer Streusysteme . . . . .	60
<b>3</b>	<b>Streusysteme mit lokal begrenztem Antrieb</b>	<b>65</b>
3.1	Rechtecktopf mit oszillierendem Boden . . . . .	66
3.1.1	Klassische Beschreibung . . . . .	66
3.1.2	Quantenmechanische Beschreibung . . . . .	75
3.2	Oszillierendes $1/\cosh^2$ -Potential . . . . .	82
3.2.1	Klassische Beschreibung . . . . .	83
3.2.2	Quantenmechanische Beschreibung . . . . .	91

<b>4</b>	<b>Streusysteme mit wechselstromartigem Antrieb</b>	<b>96</b>
4.1	Wechselstromgetriebener Rechtecktopf . . . . .	97
4.1.1	Klassische Beschreibung . . . . .	97
4.1.2	Quantenmechanische Beschreibung . . . . .	109
4.2	Wechselstromgetriebener Quantendot . . . . .	123
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>129</b>
<b>A</b>	<b>Tien-Gordon-Theorie</b>	<b>134</b>
<b>B</b>	<b>Ergänzungen der Streutheorie zeitperiodischer Potentiale</b>	<b>137</b>
B.1	Herleitung der Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen	137
B.2	Elemente der S-Matrix . . . . .	139
B.3	Der Grenzfall stationärer Streusysteme . . . . .	140
<b>C</b>	<b>Details der Kramers-Henneberger-Transformation</b>	<b>142</b>
<b>D</b>	<b>Fourierentwicklung des lateral oszillierenden Rechteckpotentials</b>	<b>145</b>
<b>E</b>	<b>Aufenthaltszeiten im Rechtecktopf mit oszillierendem Boden</b>	<b>149</b>
<b>F</b>	<b>Bewegungsgleichungen des lateral oszillierenden Rechtecktopfs</b>	<b>152</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>155</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>157</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Transporteigenschaften physikalischer Systeme spielen in vielerlei Hinsicht eine wichtige Rolle. Einerseits werden in technologischen Anwendungen wie z. B. dem Transistor oder der Diode diese charakteristischen Eigenschaften gezielt ausgenutzt. Andererseits erfolgt die Untersuchung physikalischer Systeme in vielen Fällen mit Hilfe der Messung ihrer Transporteigenschaften. Dabei kommen häufig Wechsellspannungen oder andere zeitperiodische, äußere Felder zum Einsatz, wodurch eine zusätzliche Möglichkeit zur Kontrolle des betrachteten Systems gegeben ist [1, 2]. Oft lassen sich *Transportphänomene* als *Streuprozesse* beschreiben. Somit hat die Behandlung *zeitabhängiger Streusysteme* eine große Bedeutung, und sie steht unter anderem auch aus diesem Grund im Mittelpunkt dieser Arbeit.

Für den Fall zeitunabhängiger Potentiale und ebenfalls zeitunabhängiger angelegter Spannungen, die den Transport durch das System verursachen, liefert die *Landauer-Büttiker-Theorie* die angesprochene Verbindung zwischen den Transporteigenschaften und der streutheoretischen Behandlung des Systems [3–7]. Einige Erweiterungen dieser Vorgehensweise auf den Fall zeitperiodischer Systeme konnten bereits erzielt werden: So wurde die Antwort des betrachteten zeitunabhängigen Systems auf kleine, zeitperiodische, äußere Spannungen in [8–11] untersucht.

Neben dem Streuansatz existieren auch diverse weitere Methoden zur Beschreibung von Transportphänomenen. Verschiedene Ansätze können z. B. in [12–17] gefunden werden, wobei in diesen Arbeiten die Wechselwirkung zwischen den Leitungselektronen berücksichtigt wurde. Formulierungen unter Benutzung Greenscher Funktionen sind in [18–20] zu finden und in Referenz [21] wurde ein Ansatz basierend auf einer Boltzmann-Gleichung vorge-

stellt.

Die Untersuchung von Transporteigenschaften *mesoskopischer Systeme* in Anwesenheit zeitlich periodischer Felder hat sich in den letzten Jahren zu einem sehr aktiven Forschungsgebiet entwickelt (siehe z. B. [22, 23]). Dabei werden Quantensysteme, deren Phasenkohärenz über eine räumliche Ausdehnung erhalten bleibt, die an makroskopische Skalen (ca.  $1\mu\text{m}$ ) heranreicht, als mesoskopisch bezeichnet, da sie zwischen mikroskopischen und makroskopischen Systemen liegen.

Ein im Zusammenhang mit zeitlich periodischen, äußeren Feldern wichtiges Phänomen stellt das *Photon-assisted-tunneling* [24] dar: Dabei betrachtet man den Transport durch einen *Quantendot*, welcher in einem eindimensionalen Schnitt als eine Doppelbarrierenstruktur mit einer zentralen Mulde, die mehrere diskrete, quasigebundene Zustände enthält, modelliert werden kann. Die Transmission ist für ein einlaufendes Teilchen, dessen Energie einer der Energien der quasigebundenen Zustände entspricht, am größten. Wird nun ein zeitperiodisches, äußeres Feld eingeschaltet, so sind weitere Maxima in der Transmission vorhanden, die bei Energien  $E^* + n\hbar\omega$  liegen, wobei  $E^*$  die Energie eines der quasigebundenen Zustände und  $\omega$  die Frequenz des äußeren Feldes bezeichnet. Das einlaufende Teilchen kann also die Energie von  $n$  Photonen aufnehmen oder abgeben, um dann die Resonanzbedingung zur leichteren Überwindung der Doppelbarriere zu erfüllen.

Der Effekt des Photon-assisted-tunneling konnte in den letzten Jahren in zahlreichen Experimenten beobachtet werden. Es sind dabei sowohl Messungen an einzelnen Quantendots [25–30] als auch an Übergittern [31–34] vorgenommen worden. Eine weitere interessante Variante besteht in der Möglichkeit, Systeme gekoppelter Quantendots, also künstliche Moleküle, mit Hilfe eines zeitperiodischen, externen Feldes spektroskopisch zu untersuchen [35–37].

Historisch gesehen wurde der Effekt des Photon-assisted-tunneling zum ersten Mal 1962 von Dayem und Martin bei der Messung der Transporteigenschaften einer Supraleiter-Normalleiter-Supraleiter-Anordnung in Anwesenheit eines Mikrowellenfeldes beobachtet [38]. Etwa 10 Monate später fanden Tien und Gordon eine einfache theoretische Erklärung dieses Effekts [39]. Die dabei entwickelte *Tien-Gordon-Theorie* erfreut sich heute noch großer Beliebtheit bei der quantitativen Analyse der oben angesprochenen Transportexperimente an mesoskopischen Systemen (siehe z. B. [26, 28, 30–32, 34, 37]).

Eine Übersicht über den Effekt des Photon-assisted-tunneling in Supraleiter-Isolator-Supraleiter-Anordnungen und mögliche Anwendungen ist in

Referenz [40] zu finden. Referenz [41] enthält eine theoretische Beschreibung des Photon-assisted-transport durch eine Halbleiterheterostruktur, wobei allerdings nur Einphotonenprozesse berücksichtigt wurden. Im Rahmen einer WKB-artigen Näherung wurde in [42, 43] der Transport durch eine Doppelbarrierenstruktur in Anwesenheit eines zusätzlichen zeitperiodischen Störpotentials behandelt. In Referenz [44] wurde der Transport durch Quantenpunktkontakte in Anwesenheit eines elektrischen Wechselfeldes untersucht, und in Referenz [45] ist eine numerische Behandlung des Transports in einfachen und Doppelbarrierenstrukturen, ebenfalls in Anwesenheit eines elektrischen Wechselfeldes, zu finden. Der Fall des Photon-assisted-transport durch mehrere Tunnelbarrieren ist in [46] behandelt worden. Theoretische Beschreibungen des Photon-assisted-tunneling in Systemen zweier gekoppelter Quantendots sind in [47, 48] zu finden.

Eine Beschreibung *stark getriebener Systeme*, die über eine störungstheoretische Behandlung der zeitabhängigen Terme hinausgeht, in einem möglichst großen Frequenzbereich anwendbar ist und zudem nur wenigen Einschränkungen in der Form der beschreibbaren Potentiale unterliegt, ist in den gerade zitierten Arbeiten jedoch nicht zu finden. Im folgenden wird eine Methode zur quantenmechanischen Beschreibung der Streuung eines Teilchens an einem zeitperiodischen Potential vorgestellt. Dieser Methode liegt keinerlei Störungsentwicklung zu Grunde, und sie ist prinzipiell zur Behandlung beliebiger Frequenzen und Amplituden des zeitperiodischen Antriebs geeignet. Somit werden eventuelle Multiphotonenprozesse, die für den Fall stark getriebener Systeme zu erwarten sind, korrekt beschrieben.

Die Streuung an zeitperiodischen Potentialen ist nicht nur eng mit der Beschreibung des Transports in mesoskopischen Systemen verbunden. So läßt sich z. B. die Ionisation eines Atoms in einem Mikrowellen- oder Laserfeld als offenes, zeitperiodisches System auffassen und gehört daher zu der hier betrachteten Klasse von Streusystemen. Ein wichtiges Beispiel aus der *Atomphysik* für zeitperiodische Streusysteme stellt die Ionisierung des Wasserstoffatoms in einem Mikrowellenfeld dar (siehe z. B. [49, 50]). Erste Experimente dazu sind unter anderem von Bayfield und Koch durchgeführt worden [51]. In diesem Zusammenhang ist jedoch zu beachten, daß das zeitabhängige äußere Feld in einigen experimentellen Realisierungen unter Umständen durch einen kurzen Laserpuls erzeugt wird, so daß eine reine zeitliche Periodizität nicht immer angenommen werden kann [49]. Die Untersuchung von Atomen und Molekülen in zeitperiodischen, äußeren Feldern ist auch in diesem Jahrzehnt ein aktives Forschungsgebiet (siehe z. B. [52]).

Es ist ferner darauf hinzuweisen, daß elektronische Oberflächenzustände in Anwesenheit eines zeitperiodischen, äußeren Feldes in ähnlicher Weise beschrieben werden können wie die gerade angesprochenen Systeme aus der Atomphysik [49]. Somit fallen unter gewissen Umständen auch Probleme, die im Rahmen der *Oberflächenphysik* untersucht werden, in den hier betrachteten Themenkreis.

Der Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme kommt also im Rahmen einer theoretischen Behandlung physikalischer Systeme, deren Zielsetzung in einer befriedigenden Beschreibung aktueller experimenteller Befunde liegt, eine große Bedeutung zu. Zeitperiodische Streusysteme sind aber auch im Zusammenhang mit einer *allgemeineren*, theoretischen Beschreibung von Wichtigkeit. So gehört die quantenmechanische Behandlung der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen zum üblichen Umfang der Standardwerke der Quantenmechanik (siehe z. B. [53]). Zeitperiodischer Streusysteme werden hingegen meines Wissens selbst in Textbüchern über Streutheorie gar nicht oder nur sehr kurz behandelt (siehe z. B. [54]).

Natürlich ist die Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme kein unerforschtes Gebiet: Howland untersuchte 1979 die Frage der Existenz von Mølleroperatoren in zeitperiodischen Streusystemen [55]. Weitere Arbeiten, die sich zumindest teilweise mit der allgemeinen Beschreibung der Streuung an zeitperiodischen Potentialen beschäftigen, sind in [56–60] zu finden. Die Tatsache, daß alle diese Arbeiten im Laufe der letzten fünf Jahre veröffentlicht wurden, zeigt, daß das Interesse an offenen, zeitperiodischen Systemen – nicht zuletzt aufgrund der gerade beschriebenen Anwendungen – in neuerer Zeit zu wachsen scheint.

Ebenfalls von allgemeinem, theoretischen Interesse ist die Beschreibung von *Tunnelphänomenen*. Die Untersuchung solcher Prozesse in zeitabhängigen Systemen stellt, wie schon im Rahmen der Mesoskopik angesprochen, ein aktuelles Forschungsgebiet dar [1, 2]. Ziele dieser Untersuchungen sind unter anderem die Kontrolle des Tunnelprozesses, die Beschreibung der Higher-harmonics-generation und die Manipulation der Populationsdynamik in Mehrniveausystemen. Eine Anwendung der dabei entwickelten Konzepte findet sich ebenso in der Kontrolle der Dynamik chemischer Reaktionen wie in der Kontrolle des Quantentransports.

Eine Vielzahl von Arbeiten beschäftigt sich mit der quantenmechanischen Beschreibung eines Teilchens in einem eindimensionalen zeitperiodischen Streusystem, wobei die Motivation für diese Untersuchungen zumeist in den schon genannten Anwendungen in der Mesoskopik oder der Atom-



physik liegt. Die Streuung an zeitabhängigen,  $\delta$ -förmigen Potentialen wurde in [61–63] untersucht. Der Fall stückweise konstanter Potentiale wurde in [64–71] behandelt. Beliebige, vertikal oszillierende Potentiale sind in [72] im Rahmen einer Störungsentwicklung in der Amplitude untersucht worden, und in [73, 74] sind numerische Methoden zur Behandlung zeitperiodischer Potentiale entwickelt worden. Der Fall eines bichromatischen Antriebs mit den Frequenzen  $\omega$  und  $2\omega$  wurde in [75, 76] untersucht.

Die in dieser Arbeit entwickelte Methode zur Beschreibung von zeitperiodischen Streusystemen wird auf den Fall *eindimensionaler zeitlich periodischer Streupotentiale* angewendet. Die Vorgehensweise ist jedoch im Prinzip auf Systeme höherer Dimensionalität verallgemeinerbar. Es ist darauf hinzuweisen, daß die Behandlung eindimensionaler zeitperiodischer Systeme nicht trivial ist, da diese Systeme im allgemeinen nicht separabel sind. Die in dieser Arbeit entwickelte Methode ist prinzipiell für beliebige zeitperiodische Potentiale, die die Definition asymptotisch freier Zustände zulassen, anwendbar. Durch die Verwendung der *Kramers-Henneberger-Transformation* [77] wird die Anwendbarkeit der Methode auf Systeme, die unter dem Einfluß eines räumlich homogenen elektrischen Wechselfeldes stehen, ausgeweitet. Systeme, die einem Laser- oder Mikrowellenfeld ausgesetzt sind und die im Rahmen einer Dipolnäherung adäquat beschrieben werden können, lassen sich analog zu Systemen, die dem Einfluß eines elektrischen Wechselfeldes unterliegen, behandeln und sind daher auch mit Hilfe der in dieser Arbeit entwickelten Methode beschreibbar.

Betrachtet man eindimensionale zeitabhängige Systeme vom Standpunkt der klassischen Dynamik aus, so stellt man fest, daß diese Systeme diejenigen mit der kleinsten Anzahl von Freiheitsgraden darstellen, in denen *chaotische Bewegung* möglich ist [78, 79]. Somit stellen eindimensionale zeitperiodische Streusysteme konzeptionell einfache Systeme dar, in denen *chaotische* oder *irreguläre Streuung* auftreten kann. Insbesondere im chaotischen Fall ist dabei zu beachten, daß eine *nichtstörungstheoretische* Behandlung zur quantitativen Beschreibung des Systems unerläßlich ist. Vor dem Hintergrund ihrer fundamentalen Bedeutung ist die Anzahl der Arbeiten, die sich mit der chaotischen Streuung an eindimensionalen zeitperiodischen Potentialen beschäftigen, recht klein. Periodisch gekickte Potentiale sind in [56, 80–83] untersucht worden, während kontinuierlich getriebene Streusysteme in [84, 85] behandelt wurden. Eine Ausnahme bildet die Behandlung eines wasserstoffartigen Atoms in einem Mikrowellenfeld. Dieses System ist von verschiedenen Autoren ausführlich untersucht worden, siehe z. B. [49, 86–90].

Aus dem Blickwinkel des *Quantenchaos* betrachtet, stellen eindimensionale zeitperiodische Streusysteme aufgrund der kleinen Anzahl von Freiheitsgraden potentielle Beispielsysteme zur Untersuchung eventueller Spuren klassischer, nichtlinearer Dynamik in der Quantenmechanik dar. Ferner eignen sie sich aus denselben Gründen auch als Testsysteme für semiklassische Quantisierungsmethoden. Das Wasserstoffatom in einem äußeren Mikrowellenfeld ist daher auch eines der ersten und wichtigsten Anwendungsbeispiele aus dem Gebiet des Quantenchaos [91]. Weitere Systeme sind in [56, 80–83, 92] untersucht worden.

Im Rahmen dieser Arbeit soll eine *nichtstörungstheoretische Methode zur quantenmechanischen Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme* entwickelt werden. Dabei erfolgt die Beschreibung der Streusysteme im Bild nichtwechselwirkender und nichtrelativistischer Teilchen. Die Methode soll für eine möglichst breite Klasse von Potentials anwendbar sein, wobei die periodische Zeitabhängigkeit als stetig angenommen wird. Kontinuierlich – oder spezieller – harmonisch getriebene Systeme sind für die meisten Anwendungen eine realistischere Beschreibung als periodisch geklickte Systeme, die jedoch analytisch wesentlich leichter zu beschreiben sind [56, 80–82, 92]. Insbesondere soll die zu entwickelnde Methode keinerlei prinzipiellen Einschränkungen in der Frequenz und in der Amplitude des zeitabhängigen Teils des Potentials unterliegen. Zur Untersuchung charakteristischer Eigenschaften zeitperiodischer Streusysteme einerseits und zur Demonstration der Anwendbarkeit der entwickelten Methode andererseits werden einige konkrete Beispielsysteme untersucht. Bei der Wahl der Anwendungsbeispiele wurde insbesondere darauf geachtet, daß auch die entsprechende klassische Dynamik interessante Eigenschaften aufweisen kann, so daß die Untersuchung anziehender Potentiale, in denen die Einführung einer Zeitabhängigkeit zu chaotischer Streuung führen kann, eine zentrale Rolle spielt. Die Anwendbarkeit der entwickelten Methode ist jedoch nicht auf anziehende Potentiale beschränkt, wie ebenfalls an einem Beispiel belegt wird. Neben der quantenmechanischen Beschreibung sollen auch die klassische Dynamik der Anwendungsbeispiele und die Verbindung zwischen quantenmechanischer und klassischer Beschreibung untersucht werden.

Kapitel 2 enthält eine Zusammenstellung der theoretischen Grundlagen der Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme. Zunächst werden die wichtigsten Punkte der klassischen Beschreibung der Streuung an zeitlich periodischen Potentials und der Klassifizierung des Typs der klassischen Dynamik vorgestellt. Es wird weiterhin das klassische Analogon der Kramers-

Henneberger-Transformation, mit deren Hilfe auch Systeme mit wechselstromartigem Antrieb im Rahmen der Streutheorie behandelt werden können, besprochen. Auf Seiten der Quantenmechanik wird zu Beginn eine kurze Zusammenfassung der Landauer-Büttiker-Theorie gegeben. Die zur “Standardstreutheorie” analoge Beschreibung der Streuung an zeitperiodischen Potentialen wird skizziert, und allgemeine Charakteristika dieser Art von Streusystemen werden herausgestellt. Die *Wellenpaketpropagationsmethode*, die zur Behandlung konkreter Beispielsysteme verwendet wird, wird detailliert besprochen. Dabei werden auch die  $(t, t')$ -Methode [93] zur Berechnung des Zeitpropagators eines zeitperiodischen Systems und die Kramers-Henneberger-Transformation [77] vorgestellt.

Die Verwendung der auf der Floquettheorie basierenden  $(t, t')$ -Methode garantiert, daß die zeitliche Periodizität der betrachteten Systeme in vollem Umfang berücksichtigt wird. In diesem Punkt unterscheidet sich die  $(t, t')$ -Methode von anderen Methoden zur Berechnung des Zeitpropagators wie z. B. dem *Split-Operator-Verfahren* [94], das im Prinzip für beliebige Zeitabhängigkeiten verwendbar ist. Weiterhin ist die  $(t, t')$ -Methode insbesondere sowohl zur Behandlung stark getriebener Systeme – im Sinne großer Amplituden des zeitabhängigen Teils des Potentials – als auch zur Beschreibung von Systemen mit prinzipiell beliebiger Antriebsfrequenz geeignet.

Schließlich ist anzumerken, daß die Wellenpaketpropagationsmethode auf der Beschreibung des physikalischen Systems als Streuproblem basiert und die Streuung charakterisierende Größen wie die Transmission direkt berechnet werden können, was sie von indirekten Methoden wie z. B. der *komplexen Rotation* [95] unterscheidet.

In Kapitel 3 werden Streusysteme, in denen der zeitperiodische Antrieb in einem räumlich begrenzten Gebiet erfolgt, sowohl klassisch als auch quantenmechanisch behandelt. Zu diesem Zweck werden zwei eindimensionale, zeitlich periodische Systeme betrachtet: ein Rechtecktopf mit vertikal oszillierendem Boden und ein ebenfalls vertikal oszillierendes  $1/\cosh^2$ -Potential. Im Rahmen der klassischen Beschreibung wird gezeigt, daß es sich bei dem Rechtecktopf mit oszillierendem Boden um ein pseudointegrables System handelt, während das  $1/\cosh^2$ -Potential zu einem gemischten Phasenraum führt. In der quantenmechanischen Behandlung können Multiphotonenprozesse und Resonanzen beobachtet werden. Für ausreichend hohe Frequenzen lassen sich die Resonanzenergien mit Hilfe eines durch das zeitgemittelte Potential gegebenen effektiven Potentials erklären.

In Kapitel 4 ist die Untersuchung von Systemen mit wechselstromartigem

Antrieb zu finden. Es wird zunächst die Streuung an einem wechselstromgetriebenen Rechtecktopf untersucht. Auch in diesem Fall wird sowohl die klassische als auch die quantenmechanische Streuung behandelt, wobei auch die Frage eventueller Spuren der klassischen Dynamik in der quantisierten Version des Systems untersucht wird. Im Rahmen der klassischen Behandlung wird gezeigt, daß ein moderater Antrieb zu einem gemischten System führt. Ein stärkerer Antrieb hat ein hyperbolisches System zur Folge, und ein extrem starker Antrieb führt zu einem pseudointegrablen System. In der quantenmechanischen Behandlung sind wiederum Resonanzen vorhanden, die sowohl für ausreichend niedrige als auch für ausreichend hohe Frequenzen mit Hilfe des entsprechenden effektiven Potentials erklärt werden können. Für den Fall hoher Frequenzen kann das effektive Potential eine Doppelmuldenstruktur annehmen, in der die Ausbildung von Tunneldoublets möglich ist. Das auf diese Weise zustande kommende *dynamische Tunneln* wird detailliert untersucht. Mit Hilfe der zeitintegrierten Husimidichte werden die quantenmechanische und klassische Streuung am wechselstromgetriebenen Rechtecktopf verglichen.

Als zweites Anwendungsbeispiel wird die Streuung an einem wechselstromgetriebenen Quantendot quantenmechanisch untersucht. Ebenso wie in den betrachteten Systemen mit lokal begrenztem Antrieb lassen sich Multiphotonenprozesse und Resonanzen beobachten. Ferner ist eine Unterdrückung des für die Streuung an zeitunabhängigen Doppelbarrieren charakteristischen resonanten Tunnelns zu erkennen.

Die wichtigsten Ergebnisse werden in Kapitel 5 schließlich zusammengefaßt, und Ausblicke auf mögliche, zukünftige Untersuchungen werden diskutiert.

# Kapitel 2

## Theoretische Beschreibung zeitlich periodischer Streusysteme

Zu Beginn soll die klassische Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme behandelt werden. In der Beschreibung vieler realistischer und experimenteller Situationen erscheinen zeitlich periodische Streupotentiale auf natürliche Weise, wie schon in der Einleitung diskutiert wurde. Auch wenn in vielen dieser Fälle eine quantenmechanische Beschreibung zur quantitativen Behandlung nötig ist, so ist eine Untersuchung des zugehörigen klassischen Systems für das physikalische Verständnis des betrachteten Problems oft von großem Nutzen. Desweiteren stellt die klassische Dynamik die Grundlage zur semiklassischen Behandlung physikalischer Systeme dar, die in zahlreichen Fällen eine zufriedenstellende Beschreibung des betrachteten Systems liefert [83]. Somit lassen sich einige Charakteristika eigentlich quantenmechanisch zu beschreibender, physikalischer Systeme häufig auch mit Hilfe der Untersuchung der klassischen Dynamik verstehen.

Betrachtet man zunächst ein zeitunabhängiges Streupotential und untersucht Effekte, die durch das Einschalten eines zeitabhängigen Terms des Potentials entstehen, so kann sich die Dynamik des Systems nachhaltig ändern. Dabei ist insbesondere auch der Extremfall möglich, bei dem ein ursprünglich integrables System vollständig chaotisch bzw. hyperbolisch wird.

Im folgenden Unterkapitel werden die wichtigsten Konzepte und Methoden zur Beschreibung und Klassifizierung der Streuung eines klassischen Teilchens an einem zeitlich periodischen Potential vorgestellt. Dabei wird von

räumlich eindimensionalen Systemen ausgegangen, da schon in diesen Systemen verschiedene Typen nichtlinearer Dynamik auftreten können. Die vorgestellten Konzepte sind jedoch auf Systeme höherer Dimensionalität verallgemeinerbar. Zur Klassifizierung der Systeme werden dabei stroboskopische Phasenraumabbildungen, Ablenkfunktionen und die Verteilungen der Aufenthaltszeiten untersucht.

Eine ausführliche Behandlung der klassischen Beschreibung der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen kann in [96, 97] gefunden werden. Die dort vorgestellten Konzepte können jedoch auch an den Fall zeitperiodischer Potentiale angepaßt werden.

## 2.1 Klassische Beschreibung zeitlich periodischer Streusysteme

Es soll die Streuung eines punktförmigen Teilchens an einem räumlich eindimensionalen zeitperiodischen Potential  $V(x, t) = V(x, t + T)$  beschrieben werden. Im Rahmen dieser Arbeit werden *nichtdissipative, hamiltonsche Systeme* betrachtet, deren Hamiltonfunktion durch

$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V(x, t) \quad (2.1)$$

gegeben ist, wobei  $p$  der Impuls und  $p^2/(2m)$  die kinetische Energie des Teilchens der Masse  $m$  sind.

Die Einführung einer Zeitabhängigkeit des Potentials kann zu vielfältigen neuen und interessanten Effekten führen. Betrachtet man zunächst die Streuung an einem zeitunabhängigen Potential  $V_{\text{stat}}(x)$ , so bleibt die Energie des gestreuten Teilchens erhalten. Der Phasenraum eines solchen eindimensionalen autonomen Systems ist zweidimensional und alle Systeme dieser Art sind integrabel. Für den Spezialfall rein anziehender Potentiale,  $V_{\text{stat}}(x) \leq 0$  für alle  $x \in \mathbb{R}$ , bedeutet die Energieerhaltung, daß ein mit der Energie  $E > 0$  einlaufendes Teilchen während des gesamten Streuprozesses seine Bewegungsrichtung nicht ändert und somit in jedem Fall transmittiert wird. Dabei wird angenommen, daß  $V_{\text{stat}}(x)$  für  $x \rightarrow \pm\infty$  schnell genug gegen Null geht, so daß sich das gestreute Teilchen asymptotisch frei bewegt.<sup>1</sup> Ferner kann das

---

<sup>1</sup>Diese Annahme, die an dieser Stelle noch nicht zwingend notwendig ist, hat zur Folge, daß das so definierte System als Streuproblem, auch im Hinblick auf eine spätere Quantisierung, wohldefiniert ist.

gestreute Teilchen in keiner der Mulden des Potentials  $V_{\text{stat}}(x)$  längere Zeit gefangen werden und sich dort oszillatorisch bewegen. Der Phasenraum eines solchen Systems teilt sich in zwei disjunkte Gebiete. Hat das Teilchen eine positive Gesamtenergie, so hält es sich nur endliche Zeit im Wechselwirkungsbereich des Potentials auf und entkommt dann ins Unendliche. Ein solches Teilchen bewegt sich auf einer Streubahn. Teilchen mit negativer Gesamtenergie können den Wechselwirkungsbereich, also die oder eine der Potentialmulden, nicht verlassen und sind gefangen.

Im Falle eines zeitabhängigen Potentials gilt die Energieerhaltung nicht mehr. Für räumlich eindimensionale Systeme ist der Phasenraum dreidimensional: Das nichtautonome System der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p}(x, p, t), \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x, p, t),\end{aligned}$$

wobei  $H(x, p, t)$  die explizit zeitabhängige Hamiltonfunktion ist, läßt sich mit Hilfe einer neuen, freien Variable  $z := \alpha t$  in ein autonomes System dreier Differentialgleichungen erster Ordnung umschreiben:

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p}(x, p, [z/\alpha]), \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x, p, [z/\alpha]), \\ \dot{z} &= \alpha.\end{aligned}\tag{2.2}$$

Ist die Zeitabhängigkeit der Hamiltonfunktion  $H(x, p, t)$  periodisch, so ist die neue, freie Variable  $z$  winkelartig. Dabei ist es sinnvoll, zeitperiodische Systeme in zwei Klassen einzuteilen: periodisch gekickte und kontinuierlich getriebene Systeme. Letztere lassen sich im eindimensionalen Fall durch die Bewegungsgleichungen (2.2) beschreiben. Periodisch gekickte Systeme hingegen lassen sich am einfachsten durch eine zweidimensionale, diskrete Abbildung beschreiben (siehe z. B. [79]). Im folgenden werden kontinuierlich getriebene Systeme betrachtet.

Betrachtet man wieder den Fall eines rein anziehenden Streupotentials, für das  $V(x, t) \leq 0$  gilt, so kann sich die Energie des Teilchens im Laufe des Streuprozesses ändern. Auch hier wird angenommen, daß  $V(x, t)$  für  $x \rightarrow \pm\infty$  schnell genug gegen Null geht, so daß sich das gestreute Teilchen

wiederum asymptotisch frei bewegen kann. Nun ist es möglich, daß das Teilchen seine Bewegungsrichtung ändert, und somit sind *sowohl Transmission als auch Reflexion* möglich. Desweiteren kann das Teilchen im Laufe der Streuung so viel Energie abgeben, daß seine Gesamtenergie negativ wird und es sich oszillatorisch in einer der Mulden des Potentials bewegt. Es ist die Möglichkeit gegeben, daß das Teilchen für bestimmte Anfangsbedingungen auf diese Weise sehr lange im Wechselwirkungsbereich des Potentials gefangen bleibt und es zu *Resonanzphänomenen* kommt. Ferner kann die Streuung an einem räumlich eindimensionalen zeitperiodischen Potential *chaotisch* sein. Schließlich ist es möglich, daß sich keine Anfangsbedingungen mehr finden lassen, die zu gefangenen Teilchen führen, die den Wechselwirkungsbereich des Potentials nicht verlassen können. Letzteres ist im allgemeinen dann zu erwarten, wenn die zeitabhängigen Terme das gesamte Potential dominieren. Im allgemeinen ist aber die Möglichkeit gegeben, daß nur Teilbereiche des Phasenraums für Streubahnen zugänglich sind. Daher sollten zur eindeutigen Klassifizierung eines zeitperiodischen Streusystems verschiedene Kriterien überprüft werden.

Ziel dieses Teils der Arbeit ist nicht etwa eine umfassende Behandlung der Bewegung eines klassischen Massenpunktes in einem beliebigen eindimensionalen zeitperiodischen Streusystem, sondern lediglich die Klassifizierung des Typs der Dynamik der im weiteren Verlauf der Arbeit zu quantisierenden Beispielsysteme. Die dabei untersuchten Systeme lassen sich in zwei Klassen einteilen:

- Der zeitlich periodische Antrieb erfolgt nur in einem räumlich begrenzten Gebiet.
- Der zeitlich periodische Antrieb läßt sich wie ein räumlich homogenes elektrisches Wechselfeld beschreiben.

Die beiden Systemtypen werden im Anschluß in den nächsten Abschnitten noch genauer vorgestellt.

Um den Typ der Dynamik dieser Beispielsysteme eindeutig klassifizieren zu können, wird wie folgt verfahren:

- Untersuchung stroboskopischer Bilder der Trajektorien im Phasenraum,
- Untersuchung der Eigenschaften der Ablenkfunktion,
- Berechnung der Verteilung der Aufenthaltszeiten.



Zu diesem Zweck werden die Bewegungsgleichungen im allgemeinen numerisch integriert. Die einzelnen Methoden zur Klassifizierung der Dynamik sollen nun kurz vorgestellt werden. Sie kommen dann in den Kapiteln 3 und 4 zur Anwendung.

### 2.1.1 Klassifizierung der Dynamik

#### Stroboskopische Bilder der Trajektorien im Phasenraum

Bei der Erstellung stroboskopischer Phasenraumbilder wird eine große Anzahl Trajektorien, die alle in derselben Phasenlage der Oszillation des Potentials in den Wechselwirkungsbereich einlaufen, verfolgt und jeweils nach ganzzahligen Vielfachen der Periode des zeitperiodischen Potentials in der  $(x, p)$ -Ebene des Phasenraums abgebildet (siehe Gleichungssystem (2.2)). Somit spielen stroboskopische Phasenraumbilder die Rolle von Poincaréschnitten [78] in eindimensionalen zeitperiodischen Systemen [79].

Die Interpretation der stroboskopischen Phasenraumabbildungen ist völlig analog zu der üblichen Interpretation von Poincaréschnitten. Ein einzelner Fixpunkt in einer stroboskopischen Phasenraumabbildung stellt einen (stabilen) periodischen Orbit mit der Periode  $T$ , also der Periode des zeitperiodischen Potentials, dar. Eine Kette von  $n \in \mathbb{N}$  Punkten, die im Verlauf der Zeit immer in derselben Reihenfolge durchlaufen werden, ist das Abbild eines periodischen Orbits der Periode  $nT$ , und *reguläre Bereiche* zeichnen sich durch in der Regel einfach strukturierte Bereiche aus, in denen sich die Punkte der stroboskopischen Phasenraumabbildung auf eindimensionalen Kurven anordnen. *Chaotische Bereiche* hingegen sind als irregulär erscheinende, ausgedehnte “Punktwolken” sichtbar (siehe Kap. 3 und 4 sowie z. B. [98]).

In *integrablen Systemen* ist die Anzahl der Erhaltungsgrößen gleich der Anzahl der Freiheitsgrade. Trajektorien zu in einem endlichen Raumbereich gefangenen Bahnen bewegen sich im Phasenraum auf Tori. Chaotische Bereiche im Phasenraum sind nicht vorhanden. Auch im Falle *pseudointegrabler Systeme* sind keine chaotischen Bereiche im Phasenraum vorhanden, aber die zu gefangenen Bahnen gehörigen Trajektorien bewegen sich auf Mannigfaltigkeiten, deren Topologie komplizierter als die eines Torus ist. *Gemischte Systeme* zeichnen sich durch die Existenz regulärer und chaotischer Bereiche im Phasenraum aus, was für die überwältigende Mehrheit aller physikalischen Systeme zutrifft. *Hyperbolische Systeme* sind schließlich dadurch gekennzeichnet, daß keine regulären Bereiche im Phasenraum vorhanden sind.

In diesem Fall sind alle periodischen Orbits des Systems instabil, und Trajektorien mit ähnlichen Anfangsbedingungen entfernen sich im Laufe der Zeit exponentiell voneinander, unabhängig von der konkreten Wahl der Anfangsbedingungen [50, 78]. Gutzwiller bezeichnet die Bewegung in hyperbolischen Systemen als *hartes Chaos* [50]. Hyperbolische Systeme können in gewissem Sinne als das “genaue Gegenteil” integrierbarer Systeme bezeichnet werden [50].

### Eigenschaften der Ablenkfunktion

Die Ablenkfunktion ist hier als der Impuls des auslaufenden Teilchens als Funktion des Impulses des einlaufenden Teilchens definiert. Dabei erreichen auch hier alle einlaufenden Teilchen den Wechselwirkungsbereich in derselben Phasenlage des zeitlich oszillierenden Potentials. Selbstähnliche Strukturen in der Ablenkfunktion sind ein Zeichen topologischen Chaos im dynamischen Fluß [96] und deuten somit auf die Existenz *chaotischer Bereiche* im Phasenraum hin, wie nun erläutert wird.

Qualitativ läßt sich dieses Verhalten mit Hilfe der instabilen periodischen Orbits erklären [99]. Im Falle der regulären Streuung an einem zweidimensionalen, radialsymmetrischen, zeitunabhängigen Potential z. B., das einen isolierten, instabilen periodischen Orbit “auf der Innenseite des Kamms” einer ringförmigen Barriere besitze, bewegen sich asymptotisch gefangene Trajektorien spiralförmig auf den instabilen periodischen Orbit zu. Mathematisch ausgedrückt, bewegt sich das Teilchen in diesem Fall auf der stabilen Mannigfaltigkeit des periodischen Orbits. Eine sinnvolle Definition der Ablenkfunktion ist in dieser Situation der Winkel zwischen aus- und einlaufender Richtung des Teilchens als Funktion des Stoßparameters des einlaufenden Teilchens. Wird im obigen Beispiel bei der Variation des Stoßparameters die Anfangsbedingung, die zur asymptotisch gefangenen Trajektorie gehört, überschritten, so führt dies zu einer starken Änderung in der Ablenkfunktion. Sind in einem beliebigen Streusystem die zu asymptotisch gefangenen Trajektorien gehörenden Anfangsbedingungen isoliert voneinander, so daß die Ablenkfunktion zwischen diesen Anfangsbedingungen glatt ist, so ist die Streuung *regulär*. Im Falle der *chaotischen Streuung* sind hingegen in den chaotischen Bereichen des Phasenraums unendlich viele instabile periodische Orbits vorhanden [100], deren stabile Mannigfaltigkeiten alle bis ins Unendliche reichen, also in den Bereich der asymptotisch freien, einlaufenden Zustände hinein. Im chaotischen Fall besteht dieser Repeller aus überabzählbar vielen instabilen periodischen Orbits und er hat eine fraktale Struktur [49, 50]. Werden die An-

fangsbedingungen, die zu einer der stabilen Mannigfaltigkeiten gehören, bei der Variation eines der Kontrollparameters der Anfangsbedingungen überschritten, so führt dies zu starken Oszillationen in der Ablenkfunktion bzw. zu Divergenzen in der Aufenthaltszeit des Teilchens im Wechselwirkungsbereich [99]. Die fraktale Struktur des Repellers spiegelt sich dann in der fraktalen Struktur der Ablenkfunktion wider [49, 99].

Für Potentiale, deren Betrag stets endlich bleibt, ist der Effekt des Potentials im Grenzfall einer unendlich hohen Energie des einlaufenden Teilchens vernachlässigbar klein, so daß für große Energien auch keine chaotische Streuung auftreten kann.

### Verteilung der Aufenthaltszeiten

Bei der Berechnung der Verteilung der Aufenthaltszeiten werden Trajektorien mit einlaufenden Impulsen aus einem kleinen Intervall zu verschiedenen Phasenlagen des Potentials, gleichmäßig verteilt über eine Periode der Oszillation, betrachtet. Interessant für die Klassifizierung der Dynamik des betrachteten Systems ist dabei insbesondere das Verhalten für große Aufenthaltszeiten. Ein exponentieller Abfall der Verteilung der Aufenthaltszeiten für lange Zeiten ist ein Zeichen hyperbolischer Systeme; ein algebraischer Abfall deutet hingegen auf nichthyperbolische Dynamik hin [101].

In einem hyperbolischen System ist die Bewegung in den zugänglichen Gebieten des Phasenraums ergodisch. Betrachtet man denjenigen Bereich des Phasenraums, der zu im Wechselwirkungsbereich befindlichen Teilchen gehört, so gibt es einen endlichen Anteil, der zu Trajektorien gehört, die in einem Zeitintervall der Länge  $dt$  den Wechselwirkungsbereich verlassen werden und ins Unendliche entkommen. Aufgrund der Ergodizität der Bewegung entkommt pro Zeitintervall  $dt$  immer derselbe Anteil der noch gefangenen Trajektorien. Insgesamt führt dieses Verhalten dazu, daß das betrachtete hyperbolische System *exponentiell* zerfällt [81, 102–105]. Ist hingegen das betrachtete System gemischt und somit nichthyperbolisch, sind also *Stabilitätsinseln* vorhanden, so können die Trajektorien des (oder der) chaotischen Bereiche für lange Zeit in der Nachbarschaft der regulären Bereiche des Phasenraums festgehalten werden, was zu einem langsameren, *algebraischen* Zerfall des Systems führt [81, 102–104]. Dieses Verhalten kann mit Hilfe der *Cantori* erklärt werden, die die regulären Bereiche des Phasenraums umschließen und deren “Durchlässigkeit” für Trajektorien sehr gering ist [79, 103]. Als Cantorus wird ein “aufgebrochener” KAM-Torus bezeichnet (siehe z. B. [79]).

Dabei wird die stetige und damit undurchlässige Barriere des KAM-Torus zu einem Fraktal, und die Trajektorien des Phasenraums können durch den Cantorus hindurchdiffundieren. Ein weiterer Grund für den langsamen, algebraischen Zerfall gemischter Systeme liegt in der “Klebrigkeit” der Hierarchien der Ketten von Stabilitätsinseln, in deren Nähe sich auch chaotische Bahnen nichtdiffusiv bewegen [103].

Im Falle integrierbarer oder pseudointegrierbarer Systeme, in denen keine chaotischen Bereiche im Phasenraum vorhanden sind, kann ein *algebraischer* Abfall der Verteilung der Aufenthaltszeiten in einigen Fällen mit Hilfe eines *Resonanzmechanismus* erklärt werden (siehe z. B. Abschnitt 3.1.1). Dabei sind Trajektorien, die marginal stabilen, periodischen Orbits, die den Wechselwirkungsbereich nicht verlassen können, sehr nahe kommen, für den langsamen Zerfall des Systems verantwortlich. Ein weiteres Argument für einen algebraischen Zerfall beruht auf der Existenz von *Familien periodischer Orbits*, die zu Zerfällen auf *verschiedenen* Zeitskalen führen, was insgesamt einen algebraischen Abfall der Verteilung der Aufenthaltszeiten zur Folge hat [104, 106].

Ein algebraischer Abfall der Verteilung der Aufenthaltszeiten läßt also auf die Existenz *regulärer Bereiche* im Phasenraum schließen.

### 2.1.2 Systeme mit zeitperiodischem Antrieb in einem räumlich begrenzten Gebiet

Es sollen zunächst zeitperiodische Potentiale des Typs

$$V(x, t) = V_0(x) + V_1(x) \cos(\omega t) \quad (2.3)$$

betrachtet werden. Die Hamiltonfunktion dieser Systeme ist durch Gleichung (2.1), Seite 12, gegeben. Es wird angenommen, daß sowohl das zeitunabhängige Potential  $V_0(x)$  als auch der durch  $V_1(x)$  bestimmte zeitabhängige Teil des Potentials für große Beträge von  $x$  schnell genug gegen Null gehen, so daß sich das gestreute Teilchen asymptotisch frei bewegt. Ein solches räumlich begrenztes, eindimensionales zeitperiodisches Streupotential ist zum Beispiel mit Hilfe einer zeitperiodischen Gatespannung in einem Quantendot realisierbar [30]. Dabei wird das den Quantendot beschreibende Potential in einem eindimensionalen Schnitt durch zwei Tunnelbarrieren mit einem dazwischenliegenden Potentialtopf modelliert, dessen Boden aufgrund der zeitabhängigen Gatespannung vertikal oszilliert. Die Tunnelbarrieren stellen in dieser Beschreibung die schwache Kopplung an die Zuleitungen dar. Die Faktorisierung  $V_1(x) \cdot \cos(\omega t)$  des zeitabhängigen Teil des Potentials erleichtert die

Quantisierung dieser Systeme erheblich, wie wir in Abschnitt 2.2 noch sehen werden.

Im Rahmen dieser Arbeit werden zwei konkrete Beispielsysteme mit Potentialen des in Gleichung (2.3) definierten Typs behandelt:

- Rechtecktopf mit oszillierendem Boden,
- oszillierendes  $1/\cosh^2$ -Potential.

Sind die in Gleichung (2.3) auftretenden Funktionen  $V_0(x)$  und  $V_1(x)$  von der Form

$$V_{0,1}(x) = V_{0,1} \cdot f_{0,1}\left(\left[\frac{x}{L}\right]\right) \quad , \quad V_{0,1} = \text{const}, \quad (2.4)$$

so genügt es, das mittels

$$\tilde{x} := \frac{x}{L} \quad , \quad \tilde{p} := \frac{p}{Lm\omega} \quad , \quad \tau := \omega t \quad , \quad \tilde{V}_{0,1} := \frac{V_{0,1}}{m\omega^2 L^2}, \quad (2.5)$$

definierte, dimensionslose System zu betrachten. Ausgedrückt in den gerade definierten dimensionslosen Variablen lauten die Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{x}} &:= \frac{d\tilde{x}}{d\tau} = \frac{1}{\omega L} \frac{dx}{dt} = \frac{p}{Lm\omega} = \tilde{p}, \\ \dot{\tilde{p}} &:= \frac{d\tilde{p}}{d\tau} = \frac{1}{Lm\omega^2} \left( -\frac{dV_0(x)}{dx} - \frac{dV_1(x)}{dx} \cos(\omega t) \right), \end{aligned} \quad (2.6)$$

wobei die Bewegungsgleichungen des ursprünglichen, dimensionsbehafteten Systems mit der Hamiltonfunktion  $H(x, p, t) = p^2/(2m) + V(x, t)$  benutzt wurden. Aufgrund von

$$\frac{dV_{0,1}(x)}{dx} = V_{0,1} \frac{df_{0,1}\left(\left[\frac{x}{L}\right]\right)}{dx} = \frac{V_{0,1}}{L} \frac{df_{0,1}(\tilde{x})}{d\tilde{x}}$$

gilt

$$\dot{\tilde{p}} = -\tilde{V}_0 \frac{df_0(\tilde{x})}{d\tilde{x}} - \tilde{V}_1 \frac{df_1(\tilde{x})}{d\tilde{x}} \cos(\tau). \quad (2.7)$$

Die Bewegungsgleichungen (2.6) und (2.7) sind jedoch die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen des durch die dimensionslose Hamiltonfunktion

$$\tilde{H}(\tilde{x}, \tilde{p}, \tau) := \frac{H(x, p, t)}{m\omega^2 L^2} = \frac{\tilde{p}^2}{2} + \tilde{V}_0 \cdot f_0(\tilde{x}) + \tilde{V}_1 \cdot f_1(\tilde{x}) \cdot \cos(\tau) \quad (2.8)$$

beschriebenen Systems. Diese Transformation reduziert die Anzahl der freien Parameter von fünf  $(V_{0,1}, L, \omega, m)$  auf zwei  $(\tilde{V}_{0,1})$ , wobei angenommen wird, daß die Funktionen  $f_{0,1}(\tilde{x})$  keine weiteren freien Parameter enthalten.

Periodisch gekickte Potentiale der Form  $-\lambda/\cosh^2 x$  bzw.  $-\lambda e^{-x^2}$  wurden von Šeba und Gerwinsky [82] bzw. von Šeba [81] untersucht. In beiden Fällen wurde dabei für große Stärken  $\lambda$  des Potentials hyperbolisches Verhalten und für moderatere  $\lambda$  nichthyperbolisches Verhalten gefunden. Borgonovi und Guarneri [56, 80] untersuchten ein periodisch gekicktes Streusystem, in dem die Dynamik innerhalb des Wechselwirkungsbereichs durch die *Standardabbildung* [79] gegeben ist. Für Parameterbereiche, in denen chaotische Streuung vorliegt, kann die zeitliche Entwicklung eines Ensembles von Trajektorien durch eine Diffusionsgleichung beschrieben werden.

Kontinuierlich getriebene, eindimensionale zeitperiodische Streupotentiale wurden von Eckelt und Zienicke [84] und von Fendrik und Wisniacki [85] untersucht. In Referenz [84] wurde die Struktur des die chaotische Streuung verursachenden Repellers in einem Potential der Form  $V(x, t) = -1/(x^2 + 1) - \epsilon \cos t/(x^2 + 1)^{5/2}$  detailliert behandelt. In Referenz [85] sind die Dynamik und insbesondere die Verteilung der Aufenthaltszeiten eines sich anfänglich in einem rechteckigen Topf endlicher Tiefe, dessen eine Wand periodisch in der Zeit oszilliert, befindlichen Teilchens in Abhängigkeit von der genauen Form der Oszillation der Wand untersucht worden. Dieses dynamische System läßt sich als eine offene Version des *Fermiakzellers* (siehe z. B. [79]) verstehen. Für eine sinusförmige Oszillation sind chaotische Bereiche im Phasenraum vorhanden, und die Aufenthaltszeitverteilung fällt exponentiell ab, während für eine "Sägezahnschwingung" keine chaotischen Bereiche im Phasenraum gefunden wurden und die Aufenthaltszeitverteilung algebraisch abfällt.

### 2.1.3 Systeme mit wechselstromartigem Antrieb

Ein Teilchen der Ladung  $q$ , das sich in einer Raumdimension im Potential  $V(x)$  unter dem Einfluß eines räumlich homogenen elektrischen Wechselfeldes  $E \sin(\omega t)$  bewegt, läßt sich im Hamiltonformalismus durch

$$H(x, p, t) = \frac{p^2}{2m} + V_{\text{ges}}(x, t), \quad (2.9)$$

$$V_{\text{ges}}(x, t) = V(x) - qEx \sin(\omega t) \quad (2.10)$$

mittels der üblichen hamiltonschen Bewegungsgleichungen beschreiben. Falls sich das Teilchen unter dem Einfluß von Laser- oder Mikrowellenstrahlung

bewegt und die Beschreibung des Effekts dieser Felder im Rahmen einer Dipolnherung zulssig ist, hat die Hamiltonfunktion des Systems dieselbe Struktur wie (2.9) bzw. (2.10).

Ist das Potential wiederum von der Form  $V(x) = V_0 \cdot f_0([x/L])$  und setzt man  $V_1(x) := V_1 \cdot f_1([x/L])$  mit  $V_1 := qEL$  und  $f_1([x/L]) := x/L$ , so knnen auch in diesem Fall ber Gleichung (2.5) dimensionslose Groen eingefhrt werden.

Die klassische Dynamik des Ionisationsprozesses des Wasserstoffatoms in einem Mikrowellenfeld ist von verschiedenen Autoren in unterschiedlichen eindimensionalen Modellen untersucht worden [86–90]. Die betrachteten Systeme zeigen allesamt chaotische Streuung.

Im folgenden sei fr das Potential  $V(x)$  vorausgesetzt, da es fr  $|x| \rightarrow \infty$  schnell genug abfllt, so da sich das gestreute Teilchen (bei abgeschaltetem elektrischen Feld) asymptotisch frei bewegt. Ist das elektrische Wechselfeld jedoch eingeschaltet, so wchst  $V_{\text{ges}}(x, t)$  mit  $|x|$  fr groe  $|x|$  und die Methoden konventioneller Streutheorie knnen nicht direkt angewendet werden. Diese Schwierigkeit kann allerdings mit Hilfe einer geeigneten Koordinatentransformation beseitigt werden, wie im nchsten Abschnitt gezeigt wird.

### 2.1.4 Klassisches Analogon der Kramers-Henneberger-Transformation

Es wird die Streuung eines Massenpunktes am Potential  $V_{\text{ges}}(x, t)$  aus Gleichung (2.10) betrachtet. Fr gengend groe  $|x|$  ist der Einflu des rumlich begrenzten Potentials  $V(x)$  auf ein ein- oder auslaufendes Teilchen vernachlssigbar klein. Daher bewegt sich ein am Potential  $V_{\text{ges}}(x, t)$  gestreutes Teilchen in diesen Bereichen nur unter dem Einflu des elektrischen Wechselfeldes  $E \sin(\omega t)$ . Die Geschwindigkeit des Teilchens ist durch eine Konstante plus einen harmonisch oszillierenden Term gegeben. Beschreibt man nun die Bewegung des Teilchens in einem neuen Koordinatensystem, das gegenber dem alten Bezugssystem genau diese Oszillation ausfhrt, so ist die Geschwindigkeit des gestreuten Teilchens konstant und das Teilchen kann als frei bezeichnet werden. Das rumlich begrenzte Potential  $V$  oszilliert jedoch lateral im neuen Koordinatensystem und erhlt somit eine periodische Zeitabhngigkeit. Entfernt man sich hinreichend weit vom Wechselwirkungsbereich, der im neuen Koordinatensystem durch das lateral oszillierende, rumlich begrenzte Potential  $V$  bestimmt wird, so ist der Einflu des

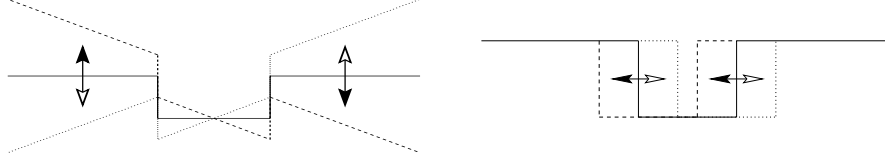


Abbildung 2.1: Mit Hilfe einer Kramers-Henneberger-artigen Transformation läßt sich ein zeitunabhängiges Potential in Anwesenheit eines räumlich homogenen elektrischen Wechselfeldes (links, entspricht  $V_{\text{ges}}(x, t)$  aus (2.10)) in ein lateral oszillierendes Potential transformieren (rechts).

Potentials auf ein ein- oder auslaufendes Teilchen vernachlässigbar und die Bewegung des Teilchens kann im Rahmen der konventionellen Streutheorie beschrieben werden. Die beiden äquivalenten Situationen, ein räumlich begrenztes Potential plus elektrisches Wechselfeld bzw. ein lateral oszillierendes, räumlich begrenztes Potential, sind in Abbildung 2.1 für einen Rechtecktopf skizziert.

Die Argumentationsrichtung kann auch umgekehrt werden. Dazu stelle man sich vor, man wolle die Bewegung eines Teilchens, das an einem lateral, periodisch in der Zeit oszillierenden Potential gestreut wird, untersuchen. Besteht man nun darauf, die Bewegung in einem Koordinatensystem zu beschreiben, das mit dem Potential lateral oszilliert, so scheint das ein- bzw. auslaufende Teilchen ständig beschleunigt und wieder abgebremst zu werden. Dieser Effekt kann mit Hilfe von Scheinkräften, deren Einführung notwendig geworden ist, da das mit dem Potential mitbewegte Bezugssystem kein Inertialsystem ist, beschrieben werden. Die Scheinkräfte können in diesem Fall aus dem Gradienten eines skalaren Potentials proportional zu  $x \times$  zeitperiodische Funktion, also einem räumlich homogenen elektrischen Wechselfeld, oder aus einem geeignet eingeführten, ebenfalls zeitperiodischem Vektorpotential abgeleitet werden.

Eine analoge Transformation kann auch im Rahmen einer quantenmechanischen Behandlung in der Schrödingergleichung vorgenommen werden. Eine solche Koordinaten- bzw. Eichtransformation wird als *Kramers-Henneberger-Transformation* [77] bezeichnet. Die quantenmechanische Kramers-Henneberger-Transformation wird in Abschnitt 2.2.5 behandelt.

Quantitativ läßt sich das klassische Analogon der Kramers-Henneberger-Transformation folgendermaßen beschreiben: Ausgangspunkt sei die Bewegung eines Teilchens im Potential  $V(x, t)$  unter dem Einfluß eines räumlich homogenen (generalisierten) elektrischen Wechselfeldes proportional zu  $f(t)$ .



In den späteren Anwendungen der Transformation wird angenommen, daß  $f(t)$  periodisch in der Zeit ist und daß das Potential  $V(x, t)$  die Definition asymptotisch freier Zustände zuläßt. Im folgenden werden die Lagrangeschen Bewegungsgleichungen betrachtet.

**Wechselstrombild:** Die Lagrangefunktion ist durch

$$L_{\text{ac}}(x, \dot{x}, t) = T - V_{\text{ges}} = \frac{m}{2} \dot{x}^2 - V(x, t) + x f(t) \quad (2.11)$$

gegeben. Die Lagrangesche Bewegungsgleichung lautet

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L_{\text{ac}}}{\partial \dot{x}} &= \frac{\partial L_{\text{ac}}}{\partial x} \\ \ddot{x} &= \frac{1}{m} \left( f(t) - \frac{\partial V}{\partial x}(x, t) \right). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Moiseyev bezeichnet diese Darstellung als *Längeneichung* [107].

**Lateral oszillierendes Potential:** Nun soll die Dynamik in einem neuen Koordinatensystem beschrieben werden,

$$\xi := x - q(t) \quad \text{mit} \quad q(t) := \frac{1}{m} \int^t dt' p(t'), \quad p(t) := \int^t dt' f(t'). \quad (2.13)$$

Das Potential  $V$  bewegt sich im neuen Koordinatensystem (für periodische  $f(t)$  oszilliert es lateral). Somit sind die Lagrangefunktion und die Bewegungsgleichung durch

$$L_{\text{lo}}(\xi, \dot{\xi}, t) = \frac{m}{2} \dot{\xi}^2 + V([\xi + q(t)], t) \quad (2.14)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L_{\text{lo}}}{\partial \dot{\xi}} &= \frac{\partial L_{\text{lo}}}{\partial \xi} = -\frac{\partial V}{\partial x}(x, t) \frac{\partial x}{\partial \xi} = -\frac{\partial V}{\partial x}(x = [\xi + q(t)], t) \\ \ddot{\xi} &= -\frac{1}{m} \frac{\partial V}{\partial x}(x = [\xi + q(t)], t) \end{aligned} \quad (2.15)$$

gegeben. Diese Darstellung wird auch als *Beschleunigungseichung* bezeichnet [107].

Die Äquivalenz der Bewegungsgleichungen (2.15) und (2.12) läßt sich mit Hilfe der Definition von  $\xi$  und  $\ddot{\xi} = \ddot{x} - \ddot{q}(t)$  leicht zeigen.

**Zeitperiodisches Vektorpotential:** Die dritte Möglichkeit besteht schließlich darin, die in der ersten Darstellung durch das elektrische Wechselfeld erzeugten Kräfte aus einem zeitlich periodischen Vektorpotential abzuleiten.

Diese Darstellung wird für die quantenmechanische Behandlung der betrachteten Systeme von großer Bedeutung sein (siehe Abschnitte 2.2.5 und 2.2.6, Seite 57). Sei also die kinetische Energie durch

$$T = \frac{1}{2m} \left( m\dot{x} - \int^t dt' f(t') \right)^2$$

gegeben. Die Lagrangefunktion und die Bewegungsgleichung lauten dann

$$L_{\text{VP}}(x, \dot{x}, t) = \frac{1}{2m} \left( m\dot{x} - \int^t dt' f(t') \right)^2 - V(x, t) \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\partial L_{\text{VP}}}{\partial \dot{x}} &= \frac{\partial L_{\text{VP}}}{\partial x} \\ \ddot{x} &= \frac{1}{m} \left( f(t) - \frac{\partial V}{\partial x}(x, t) \right). \end{aligned} \quad (2.17)$$

Diese letzte Darstellung läßt sich auch als *Impulseichung* bezeichnen [107].

Die Gleichungen (2.17) und (2.12) sind offensichtlich identisch, da dasselbe System im gleichen Koordinatensystem beschrieben wird, und nur die Eichfreiheit in den Potentialen des elektromagnetischen Feldes ausgenutzt wird.

Natürlich ist eine Beschreibung im Rahmen des Hamiltonformalismus äquivalent. Um einen Vergleich mit der quantenmechanischen Formulierung (siehe Abschnitt 2.2.5) zu erleichtern, seien hier die Hamiltonfunktionen der drei äquivalenten Beschreibungsformen angegeben.

**Wechselstrombild:**

$$\begin{aligned} H_{\text{ac}}(x, p_{\text{kan}}, t) &= p_{\text{kan}}\dot{x} - L_{\text{ac}}(x, \dot{x}, t) \quad , \quad p_{\text{kan}} := \frac{\partial L_{\text{ac}}}{\partial \dot{x}} \\ H_{\text{ac}}(x, p_{\text{kan}}, t) &= \frac{p_{\text{kan}}^2}{2m} + V(x, t) - xf(t) \end{aligned} \quad (2.18)$$

**Lateral oszillierendes Potential:**

$$\begin{aligned} H_{\text{lo}}(\xi, p_{\text{kan}}, t) &= p_{\text{kan}}\dot{\xi} - L_{\text{lo}}(\xi, \dot{\xi}, t) \quad , \quad p_{\text{kan}} := \frac{\partial L_{\text{lo}}}{\partial \dot{\xi}} \\ H_{\text{lo}}(\xi, p_{\text{kan}}, t) &= \frac{p_{\text{kan}}^2}{2m} + V([\xi + q(t)], t) \end{aligned} \quad (2.19)$$

**Zeitperiodisches Vektorpotential:**

$$\begin{aligned}
H_{\text{VP}}(x, p_{\text{kan}}, t) &= p_{\text{kan}} \dot{x} - L_{\text{VP}}(x, \dot{x}, t) \quad , \quad p_{\text{kan}} := \frac{\partial L_{\text{VP}}}{\partial \dot{x}} \\
H_{\text{VP}}(x, p_{\text{kan}}, t) &= \frac{1}{2m} (p_{\text{kan}} + p(t))^2 + V(x, t) - \frac{1}{2m} (p(t))^2 \quad (2.20) \\
p(t) &= \int^t dt' f(t')
\end{aligned}$$

Im folgenden soll die Kramers-Henneberger-artige Transformation auf Systeme angewendet werden, in denen sich ein Teilchen der Ladung  $q$  in einem zeitunabhängigen Potential unter dem Einfluß eines räumlich homogenen elektrischen Wechselfeldes bewegt. Es sind also  $V(x, t) = V(x)$  und  $f(t) = qE \sin(\omega t)$ . Damit ergibt sich (siehe Gleichung (2.13)):

$$p(t) = -\frac{qE}{\omega} \cos(\omega t) \quad , \quad q(t) = -\frac{qE}{\omega^2 m} \sin(\omega t).$$

Insbesondere ist das Streupotential im Bild des lateral oszillierenden Potentials durch  $V([\xi - \lambda \sin(\omega t)])$  mit  $\lambda = (qE)/(m\omega^2)$  gegeben. Eine Gegenüberstellung der wichtigsten Eigenschaften dieses dynamischen Systems im Wechselstrombild bzw. im Bild des lateral oszillierenden Potentials ist in Tabelle 2.1 zu finden.

Wechselstrombild	Lateral oszillierendes Potential
statisches Potential + elektrisches Wechselfeld $V(x) - qEx \sin(\omega t)$	laterale Oszillation Amplitude $\lambda = (qE)/(m\omega^2)$ $V([\xi - \lambda \sin(\omega t)])$
Zeitperiodischer Antrieb im gesamten Raum <i>Streutheorie nicht direkt anwendbar</i>	Zeitperiodischer Antrieb in endlichem Raumbereich <i>Streutheorie direkt anwendbar</i>
Faktorisierung des zeitabhängigen Potentials $\phi(x) \cdot \sin(\omega t)$	keine Faktorisierung des zeitabhängigen Potentials möglich

Tabelle 2.1: Vergleich des Wechselstrombildes mit dem Bild des lateral oszillierenden Potentials.

## 2.2 Quantenmechanische Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme

In Abschnitt 2.1 hatten wir gesehen, daß das Einschalten eines zeitabhängigen Potentials in einem eindimensionalen Streusystem zu interessanten neuen Phänomenen wie z. B. chaotischer Streuung führen kann. Aus dem Blickwinkel des *Quantenchaos* stellt sich natürlich sofort die Frage, wie sich der Typ der klassischen Dynamik eines solchen dynamischen Systems in der entsprechenden, quantisierten Form des Systems widerspiegelt.

Bei der Behandlung dieser Fragestellung kamen Blümel und Smilansky [108], unter Benutzung eines *semiklassischen* Arguments, zu dem Ergebnis, daß in der S-Matrix der quantisierten Version eines Systems, welches zu chaotischer Streuung führt (genauer eines hyperbolischen Systems), *Ericssonfluktuationen* [109] vorhanden sind. Ericssonfluktuationen in der S-Matrix werden andererseits auch in einer Beschreibung von Streusystemen mit Hilfe der *Random-Matrix-Theorie* vorhergesagt [97, 108, 110]. Diese Verbindung der statistischen Eigenschaften der quantenmechanischen Beschreibung eines Systems und des Typs seiner klassischen Dynamik ist analog zu den bekannten Resultaten für gebundene Systeme [111, 112], in denen die statistischen Eigenschaften des Eigenwertspektrums, wie z. B. die *Nächste-Nachbar-Verteilung*, Informationen über die eventuelle Chaotizität des entsprechenden klassischen Systems enthalten.

Die Verbindung zwischen den Vorhersagen der Random-Matrix-Theorie und der klassischen Dynamik für Streusysteme wurde auch in Referenz [113] studiert, wobei die Korrelationen im Spektrum der Eigenphasen der S-Matrix betrachtet wurden. Insbesondere wurde die Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion der Eigenphasen der S-Matrix untersucht. Auch hier konnte im Rahmen einer semiklassischen Behandlung gezeigt werden, daß die universellen Eigenschaften der S-Matrix mit denen der Random-Matrix-Theorie übereinstimmen. Dabei konnte die Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion als eine Summe über die klassischen, instabilen periodischen Orbits ausgedrückt werden, die im chaotischen Fall, genauer gesagt im hyperbolischen Fall, eine fraktale Menge bilden, wie schon in Abschnitt 2.1.1 diskutiert wurde.

In Referenz [110] wurden semiklassische und stochastische Methoden der quantenmechanischen Beschreibung chaotischer Streuung verglichen. Neben der schon erwähnten Übereinstimmung im semiklassischen Limes konnten Beschränkungen der Gültigkeit der Random-Matrix-Theorie gefunden wer-

den. Demzufolge liefert eine Beschreibung mit Hilfe der Random-Matrix-Theorie für nicht zu große Energieintervalle gute Ergebnisse. Oberhalb eines Energieintervalls, das durch die inverse Länge des kürzesten, klassischen, instabilen periodischen Orbits gegeben ist, kann jedoch ein aus einem entsprechenden Gaußschen Ensemble gewählter Hamiltonoperator, der den Wechselwirkungsbereich des Systems modelliert, nicht mehr die zu erwartenden, nichtuniversellen Eigenschaften des betrachteten Systems liefern.

In einer neueren Arbeit von Jung und Seligman [96] ist die Integrabilität bzw. das Auftreten chaotischer Dynamik in der quantenmechanischen und in der klassischen Beschreibung von Streusystemen untersucht worden. Es konnten Kriterien für die Integrabilität der Systeme sowohl im klassischen Fall, unter Berücksichtigung der *Streuabbildung*, die dadurch entsteht, daß iterativ der auslaufende Zustand als einlaufender Zustand erneut der Streuung unterworfen wird, als auch im quantenmechanischen Fall angegeben werden. Im Rahmen der klassischen Beschreibung wurde unter Benutzung der Streuabbildung eine Hierarchie erstellt, die vom “Grad der Integrabilität” der jeweiligen Systeme abhängt. Die Konsequenzen für die entsprechenden quantisierten Systeme wurden diskutiert, wobei die Korrespondenz von Ericsonfluktuationen und klassisch hyperbolischer Dynamik bestätigt wurde, während für integrable oder gemischte Systeme noch keine rigorosen Resultate bekannt sind.

In den folgenden Abschnitten soll die quantenmechanische Behandlung zeitperiodischer Streusysteme vorgestellt werden. Im Falle mesoskopischer Systeme werden die Eigenschaften zeitperiodischer Potentiale in den meisten Fällen mit Hilfe der Messung der Transporteigenschaften des Systems untersucht. Das betrachtete System befindet sich also nicht im Gleichgewicht. Unter gewissen Voraussetzungen können die Transporteigenschaften jedoch mit dem entsprechenden, sich im Gleichgewicht befindenden Streusystem beschrieben werden. In Abschnitt 2.2.1 wird diese Verbindung der Beschreibung des elektronischen Transports in mesoskopischen Systemen und der Behandlung von Streusystemen, die im Mittelpunkt dieser Arbeit steht, kurz skizziert. Im Anschluß daran wird in Abschnitt 2.2.2 ein Überblick der theoretischen Beschreibung der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen, der quantenmechanischen Behandlung zeitperiodischer Systeme mit Hilfe der *Floquettheorie* und der Beschreibung der Streuung an zeitperiodischen Potentialen gegeben. Dabei wird insbesondere gezeigt, daß die Streuung an einem beliebigen, zeitperiodischen Potential unter Benutzung der Floquettheorie analog zur bekannten Behandlung der Streuung an einem stationären Poten-

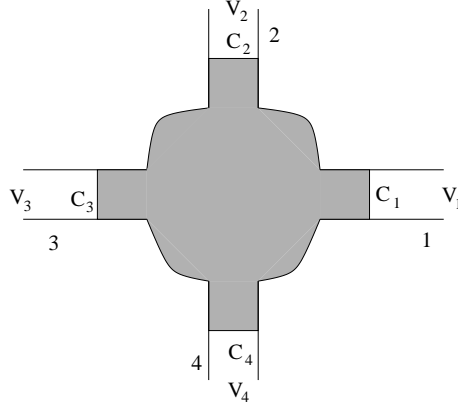


Abbildung 2.2: System (grau unterlegt) mit vier idealen Zuleitungen mit den Querschnittsflächen  $C_n$ , an denen die Spannungen  $V_n$  anliegen.

tial beschrieben werden kann. Schließlich werden die wichtigsten Eigenschaften zeitperiodischer Streusysteme zusammengefaßt und diskutiert. In den darauffolgenden Abschnitten wird die später zu verwendende Methode zur quantenmechanischen Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme ausführlich vorgestellt.

### 2.2.1 Transport in mesoskopischen Systemen und Streutheorie

Eine typische experimentelle Anordnung zur Messung der elektronischen Transporteigenschaften eines mesoskopischen Systems läßt sich im allgemeinen als ein Wechselwirkungsbereich, der z. B. einen Quantendot enthält, an den mehrere (ideale) Zuleitungen angeschlossen sind, beschreiben [4, 5]. Ein System mit vier Zuleitungen ist in Abbildung 2.2 skizziert. Sind insgesamt  $N$  Zuleitungen vorhanden, an denen die konstanten Spannungen  $V_n$  anliegen, so ist der in der  $m$ -ten Zuleitung aus dem Wechselwirkungsbereich herauslaufende Strom nach dem Ohmschen Gesetz durch

$$I_m = \int_{C_m} dy \, \mathbf{j}(\mathbf{x}) \cdot \hat{\mathbf{x}} = \sum_{n=1}^N G_{mn} V_n \quad (2.21)$$

gegeben [5].  $C_m$  bezeichnet dabei die Querschnittsfläche der  $m$ -ten Zuleitung,  $\hat{\mathbf{x}}$  ist ein auf  $C_m$  senkrechter, nach außen zeigender Normalenvektor,

und  $y$  stehe für alle Koordinaten senkrecht zu  $\hat{\mathbf{x}}$ . Die Leitfähigkeitskoeffizienten  $G_{mn}$  sind durch den Fluß des nichtlokalen Leitfähigkeitstensors  $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$  gegeben [5],

$$G_{mn} = - \int_{C_m} dy \int_{C_n} dy' \hat{\mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \cdot \hat{\mathbf{x}}'. \quad (2.22)$$

Da die  $G_{mn}$  nur vom asymptotischen Verhalten des Leitfähigkeitstensors abhängen, liegt eine Beschreibung des Systems als *Streuproblem* nahe. Diese Vorgehensweise ist unter dem Namen *Landauer–Büttiker–Theorie* bekannt [3, 4]. Landauer betrachtete zunächst Anordnungen mit zwei Zuleitungen [3]. Später fanden Fisher und Lee für das gleiche System eine Formulierung unter Benutzung Greenscher Funktionen [7]. Büttiker verallgemeinerte schließlich Landauers Ansatz auf Anordnungen mit  $N$  Zuleitungen [4]. Eine ausführliche Behandlung der Landauer–Büttiker–Theorie im Rahmen einer mikroskopischen Theorie kann in [6] gefunden werden. Ausgangspunkt ist dabei die *Kubo–Greenwood–Formel* [5, 114] der *linearen Antworttheorie*.

Die das betrachtete mesoskopische System charakterisierenden Leitfähigkeitskoeffizienten  $G_{mn}$  sind durch

$$G_{mn} = \frac{2e^2}{h} \text{tr}(S_{mn} S_{mn}^\dagger) \quad , \quad m \neq n \quad (2.23)$$

gegeben [5], dabei bezeichnet  $e$  die Elektronenladung,  $h$  ist die Plancksche Konstante und  $S_{mn}$  ist die die  $m$ -te mit der  $n$ -ten Zuleitung verbindende Streumatrix. Die Spur läuft über alle Kanäle<sup>2</sup> in den Zuleitungen, und es gilt  $T_{mn} = \text{tr}(S_{mn} S_{mn}^\dagger)$ . Der Leitfähigkeitskoeffizient  $G_{mn}$  ist also proportional zur totalen quantenmechanischen Transmissionswahrscheinlichkeit  $T_{mn}$  von der  $n$ -ten in die  $m$ -te Zuleitung. Dieses Ergebnis gilt im Rahmen der linearen Antworttheorie für nicht zu große  $|V_n - V_m|$ . Es unterliegt jedoch formal keiner Beschränkung in der Stärke des Potentials innerhalb des Systems bzw. Wechselwirkungsbereichs. Es besagt, daß die Antwort des betrachteten Systems auf äußere Gleichspannungen nur von den Gleichgewichtseigenschaften des Systems abhängt und vereinfacht somit die Beschreibung von Transportphänomenen ganz erheblich [5].

Die Landauer–Büttiker–Formel (2.23) gilt in dieser Form für zeitunabhängige Systeme und verbindet die Gleichstromantwort des betrachteten Systems mit dem entsprechenden, ungestörten Streusystem. Die Streuung an zeitperiodischen Potentialen kann jedoch in analoger Weise zur Streuung an

---

<sup>2</sup>transversale Moden im zwei- und dreidimensionalen Fall

zeitunabhängigen Potentialen formuliert werden (siehe Seite 37 ff.). Dabei treten neben den in Formel (2.23) im mehrdimensionalen Fall vorhandenen (transversalen) Kanälen noch sogenannte Floquetkanäle [56] auf, die jedoch formal völlig analog zu den schon bekannten Kanälen des zeitunabhängigen Problems behandelt werden können. Für Systeme, in deren Wechselwirkungsbereich sich ein zeitperiodisches Potential befindet, sollte daher im Bild *nichtwechselwirkender* Teilchen zu erwarten sein, daß sich die Gleichstromantwort durch eine zu (2.23) analogen Formel – mit der entsprechenden S-Matrix für zeitperiodische Potentiale – beschreiben läßt. Dabei muß natürlich angenommen werden, daß das betrachtete zeitperiodische Potential die Definition asymptotisch freier Zustände zuläßt und somit einen endlichen Wechselwirkungsbereich besitzt. In der in Abbildung 2.2 dargestellten Anordnung wäre der Einflußbereich des zeitperiodischen Potentials also auf den grau unterlegten Bereich beschränkt. Als Gleichstromantwort in linearer Antworttheorie ist die Antwort des Systems auf verschwindend kleine, zeitlich konstante Potentiale in den Zuleitungen zu verstehen, was in der Anordnung von Abbildung 2.2 zeitlich konstanten und kleinen  $|V_n - V_m|$  entspricht. Eine rigorose Herleitung der zu erwartenden Landauer-Büttiker-artigen Formel für zeitperiodische Potentiale sollte auf einer Verknüpfung der Floquettheorie und der linearen Antworttheorie aufbauen.

Der Streuansatz zur Beschreibung des kohärenten Quantentransports in mesoskopischen Systemen ist auch auf die Untersuchung der Wechselstromantwort ausgeweitet worden [8–11]. Dabei sind in [11] auch Wechselwirkungseffekte wie Ladungsabschirmung berücksichtigt worden, und das Potential innerhalb des Systems muß selbstkonsistent bestimmt werden. Die Effekte der zeitperiodischen Potentiale sind hingegen nur störungstheoretisch – es werden nur Ein- und Zwei-Photonenprozesse berücksichtigt – behandelt worden.

In Referenz [21] wurde die Gleichstromantwort (Wechselstromantwort) des elektronischen Transports unter dem Einfluß eines räumlich homogenen Mikrowellenfeldes im Rahmen einer Behandlung mit Hilfe einer *Boltzmann-gleichung* in Relaxationszeitnäherung untersucht. Die Gleichstromantwort (Wechselstromantwort) wurde im Rahmen der linearen Antworttheorie für eine kleine, den Transport verursachende Gleichspannung (Wechselspannung) definiert, während die Stärke des Mikrowellenfeldes im Prinzip in vollem Umfang berücksichtigt werden kann. Für den Fall eines eindimensionalen, perfekt leitenden Drahtes, also eines verschwindenden statischen Streupotentials für die Leitungselektronen, kann die Leitfähigkeit in Anwesenheit des Mikrowellenfeldes mit Hilfe der Leitfähigkeit bei abgeschaltetem Mikrowellenfeld



ausgedrückt werden. Das dabei erhaltene Ergebnis ähnelt stark dem Ergebnis der Tien-Gordon-Theorie (siehe Anhang A und [39]) und entspricht im Grenzfall der Gleichstromantwort (Frequenz der kleinen, den Transport verursachenden Wechselspannung gegen Null) dem einer vollständigen quantenmechanischen Rechnung. Desweiteren führt die Anwesenheit des Mikrowellenfeldes zu *keinerlei* Veränderung der Leitfähigkeit im betrachteten Grenzfall der Gleichstromantwort. Im allgemeinen ist jedoch eine in der Stärke des Mikrowellenfeldes nichtstörungstheoretische Auswertung des in [21] für die Leitfähigkeit hergeleiteten Ausdrucks sehr schwierig.

In Referenz [15] wurde die Wechselstromleitfähigkeit eines quasi-eindimensionalen elektronischen Systems mit einem Potential endlicher Reichweite der Elektron-Elektron-Wechselwirkung untersucht. Es konnte gezeigt werden, daß innerhalb dieses Modells die Vorhersagen der linearen Antworttheorie exakt gültig sind.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird die Streuung nichtwechselwirkender Teilchen an zeitperiodischen Potentialen betrachtet. Dabei liegt in der Beschreibung starker zeitabhängiger Potentiale besonderes Interesse, so daß eine vollständige, über eine störungstheoretische Behandlung hinausgehende Beschreibung der Effekte der periodischen Zeitabhängigkeit des Potentials nötig ist.

### 2.2.2 Streutheorie für zeitperiodische Potentiale

Bevor die Streuung an Potentialen mit periodischer Zeitabhängigkeit genauer untersucht wird, sollen noch einmal kurz die wichtigsten Punkte der nichtrelativistischen, quantenmechanischen Beschreibung der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen zusammengestellt werden. Im Anschluß daran werden die wichtigsten Punkte der Floquettheorie, mit deren Hilfe zeitperiodische Systeme quantenmechanisch beschrieben werden, zusammengefaßt. Danach wird unter Ausnutzung der Floquettheorie gezeigt, daß sich die Streuung an einem zeitperiodischen Potential analog zur Streuung an einem stationären Potential beschreiben läßt. Diese Betrachtungen werden auf rein formaler Ebene vorgenommen und sind im Prinzip für beliebige Systeme gültig. Schließlich werden die wichtigsten Eigenschaften zeitperiodischer Streusysteme noch einmal zusammengefaßt und diskutiert. Eine detaillierte Beschreibung der anwendungsorientierten Methode, die in den Kapiteln 3 und 4 zur Behandlung eindimensionaler zeitperiodischer Systeme verwendet wird, ist in den darauf folgenden Abschnitten 2.2.3 bis 2.2.6 zu finden.

### Streuung an zeitunabhängigen Potentialen

Ein Streuprozess läßt sich kurz wie folgt beschreiben: Das einlaufende Teilchen bewegt sich (asymptotisch) frei, somit wird die Zeitentwicklung in frühester Vergangenheit vom Hamiltonoperator  $H_0$  eines freien Teilchens erzeugt. In den hier betrachteten Fällen ist  $H_0$  immer durch die kinetische Energie des Teilchens gegeben. Nach dem eigentlichen Streuprozess verläßt das gestreute Teilchen den Wechselwirkungsbereich wieder und bewegt sich wiederum (asymptotisch) frei. Somit wird auch die Zeitentwicklung in ferner Zukunft von  $H_0$  erzeugt. Ziel der Streutheorie ist es, eine Verbindung zwischen den ein- und auslaufenden Zuständen herzustellen. Eine ausführliche Darstellung der Streutheorie kann z. B. in [54] gefunden werden.

Sei  $|\psi(t)\rangle$  der das Teilchen beschreibende, zeitabhängige Zustandsvektor. Die (asymptotische) Freiheit der ein- und auslaufenden Zustände drückt sich formal durch

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &\sim U_0(t)|\psi_{\text{ein}}\rangle && \text{für } t \rightarrow -\infty \\ |\psi(t)\rangle &\sim U_0(t)|\psi_{\text{aus}}\rangle && \text{für } t \rightarrow \infty \end{aligned} \quad (2.24)$$

aus. Dabei bezeichne  $U_0(t) := \exp(-iH_0t/\hbar)$  den Zeitentwicklungsoperator der freien Bewegung. Seien ferner  $V$  das Streupotential,  $H = H_0 + V$  der volle Hamiltonoperator und  $U(t) := \exp(-iHt/\hbar)$  der Zeitentwicklungsoperator des betrachteten Systems. Es gilt

$$\begin{aligned} |\psi(0)\rangle &= \lim_{t \rightarrow -\infty} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}Ht\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_0t\right\} |\psi_{\text{ein}}\rangle = \Omega_+ |\psi_{\text{ein}}\rangle, \\ |\psi(0)\rangle &= \lim_{t \rightarrow \infty} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}Ht\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_0t\right\} |\psi_{\text{aus}}\rangle = \Omega_- |\psi_{\text{aus}}\rangle. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Die Mølleroperatoren  $\Omega_{\pm} := \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^{-1}(t)U_0(t)$  verbinden also den Zustand  $|\psi(0)\rangle$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  mit dem ein- bzw. auslaufenden Zustand.<sup>3</sup> Diese Art der Beschreibung des Streuprozesses wird als *zeitabhängige Streutheorie* bezeichnet.

Die gesuchte Beziehung zwischen ein- und auslaufendem Zustand lautet

$$|\psi_{\text{aus}}\rangle = \Omega_-^\dagger \Omega_+ |\psi_{\text{ein}}\rangle, \quad (2.26)$$

$$S := \Omega_-^\dagger \Omega_+. \quad (2.27)$$

---

<sup>3</sup>In einigen Fällen muß  $\Omega_{\pm} := \lim_{t \rightarrow \mp\infty} U^{-1}(t)U_0(t)P$  definiert werden, um die Existenz des Grenzwertes zu garantieren [55, 82].  $P$  ist dabei ein geeignet gewählter Projektor.

Der Operator  $S$  heißt *Streu-* oder *S-Matrix* und verbindet die asymptotischen Zustände miteinander.  $S$  ist unitär und enthält die vollständige Information über den Streuprozess. Für zeitunabhängige Systeme gilt  $[H_0, S] = 0$ . Da die Gesamtenergie der asymptotischen Zustände gleich ihrer kinetischen Energie ist, folgt daraus, daß die Energie bei der Streuung an einem zeitunabhängigen Potential erhalten bleibt.

Die in Gleichung (2.25) eingeführten Mølleroperatoren können auch mittels

$$\Omega_{\pm}|\phi\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \mp \frac{\epsilon}{\hbar} \int_0^{\mp\infty} dt \exp\left\{-\frac{\epsilon}{\hbar}|t|\right\} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}Ht\right\} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_0t\right\} |\phi\rangle \quad (2.28)$$

eingeführt werden [54, 115]. Nimmt man – rein formal – an,  $|\phi\rangle$  sei ein (stationärer) Eigenzustand von  $H_0$  zum Eigenwert  $E$ , so erhält man [115]

$$|\phi_{\pm}\rangle := \Omega_{\pm}|\phi\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{\pm\epsilon}{i(H - E \mp i\epsilon)} |\phi\rangle. \quad (2.29)$$

Führt man ferner die Resolventen

$$G(z) := (z - H)^{-1} \quad , \quad G_0(z) := (z - H_0)^{-1} \quad (2.30)$$

ein, so erhält man nach wenigen, formalen Umformungen [115]

$$|\phi_{\pm}\rangle = |\phi\rangle + G_0(E \pm i0)V|\phi_{\pm}\rangle, \quad (2.31)$$

$$= |\phi\rangle + G(E \pm i0)V|\phi\rangle. \quad (2.32)$$

Die Gleichungen (2.31) heißen *Lippmann-Schwinger-Gleichungen* und (2.32) stellen eine formale Lösung dar. Die stationären Zustände  $|\phi_{+}\rangle$  und  $|\phi_{-}\rangle$  sind ebenfalls (generalisierte) Eigenzustände von  $H_0$  zum Eigenwert  $E$  [115], was wiederum die Energieerhaltung bei der Streuung an einem zeitunabhängigen Potential zum Ausdruck bringt. Diese Art der Beschreibung der Streuung mit Hilfe stationärer Zustände und der Lippmann-Schwinger-Gleichung wird als *zeitunabhängige Streutheorie* bezeichnet.

Um sich die physikalische Bedeutung der  $|\phi_{\pm}\rangle$  zu vergegenwärtigen, sei  $|\phi\rangle$  eine ebene Welle mit Impuls  $\hbar\mathbf{k}$  im dreidimensionalen Raum,

$$\langle \mathbf{x} | \phi \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \exp\{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}\}.$$

Es läßt sich zeigen [53, 115], daß sich  $\langle \mathbf{x} | \phi_+ \rangle$  für große  $r := |\mathbf{x}|$  wie

$$\langle \mathbf{x} | \phi_+ \rangle \approx \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[ \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}) + \frac{\exp(ikr)}{r} f(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right] \quad (2.33)$$

verhält. Dabei sind  $k := |\mathbf{k}|$  und  $\mathbf{k}' := k\mathbf{x}/r$ . Für große Entfernungen vom Wechselwirkungsbereich verhält sich  $\langle \mathbf{x} | \phi_+ \rangle$  also wie eine *Überlagerung* der *ursprünglichen, ebenen Welle*  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$  und einer *auslaufenden Kugelwelle* mit der Amplitude  $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ . Das asymptotische Verhalten von  $\langle \mathbf{x} | \phi_- \rangle$  ist hingegen durch die Überlagerung der ursprünglichen Welle mit einer *einlaufenden Kugelwelle* gegeben. In dieser stationären Beschreibung der Streuung mit Hilfe der Lippmann-Schwinger-Gleichung ist die vollständige Information über den Streuprozess in der Streuamplitude  $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$  enthalten. In den allermeisten Fällen ist der “auslaufende” Zustand  $|\phi_+ \rangle$ , der das Resultat der Streuung von  $|\phi \rangle$  am betrachteten Potential darstellt, die gesuchte Lösung der Lippmann-Schwinger-Gleichung. Der “einlaufende” Zustand  $|\phi_- \rangle$ , der am Potential gestreut zum Resultat  $|\phi \rangle$  führt, wird normalerweise äußerst schwer zu präparieren sein.

## Floquettheorie

Besitzt das Streupotential hingegen eine periodische Zeitabhängigkeit, so bleibt die Energie bei der Streuung *nicht* erhalten. Aufgrund der Periodizität der Zeitabhängigkeit bleibt jedoch die sogenannte Quasienergie erhalten. Ferner läßt sich die Streuung an zeitperiodischen Potentialen analog zur Streuung an zeitunabhängigen Potentialen beschreiben. Bevor dies gezeigt wird, sollen die wichtigsten Eigenschaften quantenmechanischer, zeitperiodischer Systeme noch einmal zusammengestellt werden.

Zeitperiodische Quantensysteme lassen sich im Rahmen der *Floquettheorie* [116] adäquat beschreiben. Die gewünschte Beschreibung der Streuung an zeitperiodischen Potentialen läßt sich schließlich aus einer “Kombination” der Floquettheorie mit der Theorie der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen ableiten. Eine Zusammenstellung der wichtigsten Elemente und Ergebnisse der Floquettheorie kann in [2, 117] gefunden werden.

Für den Hamiltonoperator eines periodischen Systems mit der Periode  $T = 2\pi/\omega$  gilt

$$H(t) = H(t + T). \quad (2.34)$$

Die zeitabhängige Schrödingergleichung für ein solches System lautet

$$\left( H(x, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(x, t) = 0. \quad (2.35)$$

(Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird ein räumlich eindimensionales System mit  $x \in \mathbb{R}$  betrachtet. Die in diesem Abschnitt angegebenen Formeln lassen sich jedoch ohne weiteres verallgemeinern.) Das Floquettheorem [2, 116, 117] besagt, daß die Lösungen der zeitabhängigen Schrödingergleichung (2.35) von der Form

$$\psi_\alpha(x, t) = \exp(-i\epsilon_\alpha t/\hbar) \Phi_\alpha(x, t) \quad (2.36)$$

sind. Die  $\Phi_\alpha(x, t)$  sind periodisch in  $t$ ,

$$\Phi_\alpha(x, t) = \Phi_\alpha(x, t + T), \quad (2.37)$$

und heißen *Floquetmoden* [2]. Der reelle Parameter  $\epsilon_\alpha$  heißt *Quasienergie* und ist bis auf ganzzahlige Vielfache von  $\hbar\omega$  bestimmt. Die Floquettheorie nutzt also die Periodizität in der Zeit in der gleichen Weise aus wie die *Blochtheorie* [118] eine räumliche Periodizität. Mit Hilfe des hermiteschen Operators

$$\mathcal{H}(x, t) := H(x, t) - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \quad (2.38)$$

erhält man

$$\mathcal{H}(x, t) \Phi_\alpha(x, t) = \epsilon_\alpha \Phi_\alpha(x, t). \quad (2.39)$$

Faßt man in den letzten beiden Gleichungen die Zeit  $t$  formal als eine neue Koordinate auf, so ist die Floquetmode  $\Phi_\alpha(x, t)$  eine Lösung der “stationären” Schrödingergleichung mit dem Hamiltonoperator  $\mathcal{H}(x, t)$  zum Eigenwert  $\epsilon_\alpha$ .  $\mathcal{H}(x, t)$  wirkt dann jedoch in einem anderen Hilbertraum als  $H(x, t)$ . Sei  $\mathcal{R}$  der Raum, in dem  $H$  wirkt (in unserem Fall ist  $\mathcal{R}$  der Raum der quadratintegrierbaren Funktionen auf  $\mathbb{R}$ ) und sei  $\mathcal{T}$  der Raum der  $T$ -periodischen Funktionen, so wirkt  $\mathcal{H}(x, t)$  im “erweiterten” Hilbertraum  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$ .

Die Floquetmode

$$\Phi_{\alpha n}(x, t) := \Phi_\alpha(x, t) \exp(in\omega t) \quad , \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.40)$$

ist ebenfalls eine Lösung von (2.39) zum Eigenwert

$$\epsilon_{\alpha n} := \epsilon_\alpha + n\hbar\omega. \quad (2.41)$$

Aufgrund dieser Eigenschaft können die Eigenwerte  $\epsilon_\alpha$  in die “erste Brillouin Zone”  $-\hbar\omega/2 \leq \epsilon \leq \hbar\omega/2$  abgebildet werden.

Die Floquetmoden  $\Phi_{\alpha n}$  mit  $n \neq 0$  und  $\Phi_\alpha$  liefern im Raum  $\mathcal{R}$  über Gleichung (2.36) zwei physikalisch identische Lösungen, während sie im Raum  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  orthogonal zueinander sind [2].

Das Skalarprodukt in  $\mathcal{R}$  sei wie üblich mittels

$$\langle \varphi_k | \varphi_l \rangle := \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_k^*(x) \varphi_l(x) = \delta_{kl}$$

definiert. Eine orthonormierte Basis von  $\mathcal{T}$  ist durch  $\exp(in\omega t)$  mit  $n \in \mathbb{Z}$  und dem Skalarprodukt

$$(n|m) := \frac{1}{T} \int_0^T dt \exp[i(m-n)\omega t] = \delta_{nm} \quad (2.42)$$

gegeben. Im Raum  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  gilt die Orthonormalitätsrelation

$$\langle \langle \Phi_{\alpha n} | \Phi_{\beta m} \rangle \rangle := \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_{-\infty}^{\infty} dx \Phi_{\alpha n}^*(x, t) \Phi_{\beta m}(x, t) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{nm}. \quad (2.43)$$

Die Basis der  $|\Phi_{\alpha n}\rangle\rangle$  ist vollständig [2],

$$\sum_{\alpha} \sum_n \Phi_{\alpha n}^*(x, t) \Phi_{\alpha n}(x', t') = \delta(x - x') \delta(t - t'). \quad (2.44)$$

Die periodische Zeitabhängigkeit des Hamiltonoperators  $H(x, t)$  aus Gleichung (2.35) hat spezielle Eigenschaften des Zeitentwicklungsoperators für Zustände aus dem Raum  $\mathcal{R}$  im Schrödingerbild zur Folge. Der Zeitentwicklungsoperator ist durch

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad , \quad U(t_0, t_0) = \mathbf{1} \quad (2.45)$$

definiert. Formal ist  $U(t, t_0)$  durch

$$U(t, t_0) = \mathsf{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right\} \quad (2.46)$$

gegeben, wobei  $\mathsf{T}$  für die Zeitordnung von Operatoren steht. Aufgrund der Periodizität von  $H(t)$  gilt [2]

$$U(nT, 0) = [U(T, 0)]^n \quad \text{für } n \in \mathbb{Z}. \quad (2.47)$$

Somit erzeugt  $U(T, 0)$  eine diskrete, quantenmechanische Abbildung, die physikalisch dem stroboskopischen Verfolgen der Zeitentwicklung des betrachteten Systems entspricht.

Gleichung (2.47) impliziert ferner die Relationen

$$U(t + T, T) = U(t, 0), \quad (2.48)$$

$$U(t + T, 0) = U(t, 0)U(T, 0). \quad (2.49)$$

Für  $t \neq nT$  vertauschen  $U(t, 0)$  und  $U(T, 0)$  nicht.

Betrachtet man ein zeitperiodisches System im “erweiterten” Hilbertraum  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  (vgl. (2.39)), so läßt es sich als *stationäres* System auffassen. Die Quasienergie  $\epsilon$  spielt dabei die Rolle der Energie eines “gewöhnlichen” stationären Systems. Analog zur Energieerhaltung in (“gewöhnlichen”) stationären Systemen gilt für zeitperiodische Systeme die *Quasienergieerhaltung*. Betrachtet man die Analogie zwischen Floquet- und Blochtheorie, so führt eine Periodizität in der Zeit zur Erhaltung der Quasienergie, während eine Periodizität im Raum die Erhaltung des Quasiimpulses [118] zur Folge hat.

### Analogon der Lippmann-Schwinger-Gleichungen für zeitperiodische Systeme

Zur Beschreibung der Streuung an zeitlich periodischen Potentialen müssen die zu Beginn dieses Abschnitts, Seite 32 bis 34, zusammengefaßten Methoden modifiziert werden. Eine zur Behandlung der Streuung an stationären Potentialen analoge Vorgehensweise ist jedoch möglich, wie in diesem Abschnitt skizziert werden soll. Hierzu bieten sich prinzipiell zwei verschiedene Möglichkeiten an. Einerseits kann ein zeitperiodisches System mit Hilfe des im letzten Abschnitt vorgestellten “erweiterten” Hilbertraums formal in ein zeitunabhängiges System transformiert werden. Auf diese Weise kann versucht werden, die Theorie der Streuung an stationären Potentialen direkt anzuwenden.<sup>4</sup> Andererseits ist es möglich, die Periodizität in der Zeitabhängigkeit und die daraus resultierenden Eigenschaften des Systems ohne eine “Vergrößerung der Dimensionalität” des Systems auszunutzen. Dabei spielt die durch den Zeitentwicklungsoperator über eine Periode definierte diskrete, quantenmechanische Abbildung (siehe Gleichung (2.47)) eine zentrale Rolle.

---

<sup>4</sup>Diese Anwendung der “üblichen” Streutheorie ist nicht trivial, da der Hamiltonoperator im “erweiterten” Hilbertraum in der kinetischen Energie eine erste Ableitung nach der “neuen” Koordinate enthält, was z. B. die Eigenschaften seines Spektrums nachhaltig verändert.

In Lehrbüchern, die sich mit der Streutheorie befassen, sucht man meines Wissens vergeblich nach einer Behandlung zeitperiodischer Streusysteme (siehe z. B. [54]). In den wissenschaftlichen Zeitschriften sind aber einige Arbeiten zu finden, die sich mit der Übertragung der Konzepte der Theorie der Streuung an stationären Potentialen auf die Streuung an zeitperiodischen Potentialen befassen. Howland untersuchte 1979 die Frage der Existenz von Mølleroperatoren in zeitperiodischen Streusystemen [55]. Peskin und Moiseyev entwickelten eine auf dem Konzept des “erweiterten” Hilbertraums basierende Methode zur Behandlung der Streuung an zeitlich periodischen Potentialen [57], um Multiphotonenionisations- und Dissoziationsprozesse zu beschreiben. Saraga und Sassoli de Bianchi konnten eine Verallgemeinerung der Bornschen Reihe für den Fall zeitperiodischer Potentiale finden [58]. In Referenz [59] wurden die Grenzfälle hoher und niedriger Frequenzen des zeitabhängigen Potentials untersucht. Die verwendete Formulierung der allgemeinen Beschreibung der Streuung an zeitperiodischen Potentialen basiert dabei auf der Floquettheorie.

Hier sollen zunächst Mølleroperatoren für zeitperiodische Streusysteme mit Hilfe der in Gleichung (2.47) definierten diskreten, quantenmechanischen Abbildung eingeführt werden. Auf dieser Basis lassen sich Analoga zu den Lippmann-Schwinger-Gleichungen (vgl. Gleichung (2.31), Seite 33) herleiten. Die Vorgehensweise basiert auf einer von Borgonovi und Guarneri entwickelten Methode für zeitlich periodisch gekickte Potentiale<sup>5</sup> [56]. Die im folgenden herzuleitenden Ergebnisse stellen eine Verallgemeinerung der von Borgonovi und Guarneri erzielten Ergebnisse auf den Fall zeitabhängiger Potentiale mit einer beliebigen periodischen Zeitabhängigkeit dar. Die folgenden Herleitungen sind unabhängig von einer kürzlich erschienenen Arbeit von Kovar und Martin [60] entstanden, in der ebenfalls Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen für zeitperiodische Streusysteme in ähnlicher Weise hergeleitet werden konnten.

Der Hamiltonoperator sei durch

$$H(t + T) = H(t) = H_0 + V(t) \quad , \quad V(t + T) = V(t) \quad (2.50)$$

---

<sup>5</sup>Die Zeitabhängigkeit des Potentials ist durch  $\sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(t - nT)$  gegeben und der Zeitentwicklungsoperator läßt sich als Produkt  $U_0 \cdot K$  schreiben, wobei  $K$  den Effekt des Kicks beinhaltet und  $U_0$  die Zeitentwicklung über eine Periode  $T$  mit einem zeitunabhängigen Potential darstellt.



gegeben. Die Zeitentwicklung eines freien Teilchens wird durch

$$u_0 := U_0(T, 0) = U_0(T) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_0T\right\} \quad (2.51)$$

beschrieben, und der Zeitentwicklungsoperator des vollen Systems über eine Periode werde mit

$$u := U(T, 0) = \mathsf{T} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^T dt' H(t')\right\} \quad (2.52)$$

bezeichnet. Die Mølleroperatoren seien formal über

$$\Omega_{\pm} := \lim_{n \rightarrow \pm\infty} u^n (u_0)^{-n} \quad (2.53)$$

definiert. Im folgenden wird von der Existenz der obigen Grenzwerte ausgegangen.

Die in die Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen eingehenden freien Zustände werden mit  $|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle$  bezeichnet. Dabei ist  $\epsilon \in (0, \hbar\omega]$  ( $\omega = 2\pi/T$ ) die Quasienergie,<sup>6</sup>  $n \in \mathbb{N}$  ist der Floquetindex, und  $\alpha$  stehe für alle weiteren Quantenzahlen, die zur vollständigen Festlegung des Zustands notwendig sind. Es gelten

$$\begin{aligned} H_0|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle &= (\epsilon + n\hbar\omega)|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle, \\ u_0|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}T\epsilon\right\}|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Die Normierung sei schließlich durch

$$\langle\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0|\psi_{\epsilon',m,\beta}^0\rangle = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} \quad (2.55)$$

gegeben. Die aus- bzw. einlaufenden Zustände sind

$$|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^{\pm}\rangle = \Omega_{\pm}|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle, \quad (2.56)$$

und die Anwendung des Zeitentwicklungsoperators  $u$  liefert

$$u|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^{\pm}\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}T\epsilon\right\}|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^{\pm}\rangle. \quad (2.57)$$

---

<sup>6</sup>Die Quasienergie ist modulo  $\hbar\omega$  definiert, vgl. Gleichungen (2.37) und (2.41). Die Lage des Quasienergieintervalls der Länge  $\hbar\omega$  auf der Energieachse kann frei gewählt werden.

Die letzte Gleichung sowie die Definition (2.53) legen ein stroboskopisches Verfolgen der Zeitentwicklung nahe, und die Zeitentwicklungsoperatoren  $u_0$  und  $u$  stellen den Ausgangspunkt der Betrachtung dar. Im Falle der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen wurde hingegen die Zeitentwicklung kontinuierlich verfolgt (vgl. Gleichungen (2.25) und (2.28)), Ausgangspunkt der Betrachtung waren hier die Erzeugenden der Zeitentwicklung, die Hamiltonoperatoren  $H_0$  und  $H$ .

Mit Hilfe der formalen Umstellungen,  $|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle = \Omega_{\pm}^{\dagger} |\psi_{\epsilon,n,\alpha}^{\pm}\rangle$ , von (2.56) und der Definition der Mølleroperatoren,  $\Omega_{\pm}^{\dagger} = \lim_{n \rightarrow \infty} (u_0)^{\pm n} u^{\mp n}$ , lassen sich die folgenden *Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen* herleiten,

$$|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^{\pm}\rangle = |\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle + \tilde{G}_0^{\pm}(\epsilon) ((u_0)^{\pm 1} u^{\mp 1} - \mathbf{1}) |\psi_{\epsilon,n,\alpha}^{\pm}\rangle \quad (2.58)$$

mit

$$\tilde{G}_0^{\pm}(\epsilon) := e^{\mp i T \epsilon / \hbar} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} ((u_0)^{\pm 1} - e^{(\mp i T \epsilon / \hbar) + \delta})^{-1}, \quad (2.59)$$

wie in Anhang B.1 gezeigt wird. Ein Vergleich mit den Lippmann-Schwinger-Gleichungen (2.31) zeigt, daß dabei die  $\tilde{G}_0^{\pm}(\epsilon)$  die Rolle der Resolventen  $G_0(E \pm i0)$  übernehmen. Die Terme  $(u_0)^{\pm 1} u^{\mp 1} - \mathbf{1}$  enthalten die durch das zeitperiodische Potential hervorgerufenen Effekte, da z. B.  $u_0^{-1} u$  zunächst die volle Zeitentwicklung über eine Periode und danach die Zeitentwicklung des freien Teilchens “zurück” über eine Periode enthält. Die Abweichung zwischen  $u_0^{\pm 1} u^{\mp 1}$  und der identischen Abbildung  $\mathbf{1}$  muß dann die Effekte des Potentials enthalten. Somit spielt  $(u_0)^{\pm 1} u^{\mp 1} - \mathbf{1}$  in Gleichung (2.58) die Rolle des (zeitunabhängigen) Potentials in den Lippmann-Schwinger-Gleichungen (2.31). Aufgrund des stroboskopischen Verfolgens der Zeitentwicklung im zeitperiodischen Fall gehen die Zeitentwicklungsoperatoren  $u$  und  $u_0$  in die Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen ein und nicht die Hamiltonoperatoren  $H$  und  $H_0$  wie im Falle der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen.

Auf formaler Ebene lassen sich auch Ausdrücke für die Matrixelemente der S-Matrix herleiten,

$$\langle \psi_{\epsilon,n,\alpha}^0 | S | \psi_{\epsilon',m,\beta}^0 \rangle = \delta(\epsilon - \epsilon') \{ \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i T_{n,\alpha;m,\beta}^{\pm} \}, \quad (2.60)$$

$$T_{n,\alpha;m,\beta}^+ := -i \frac{\hbar}{T} \langle (u u_0^{-1} - \mathbf{1}) \psi_{\epsilon,n,\alpha}^0 | \psi_{\epsilon,m,\beta}^+ \rangle, \quad (2.61)$$

$$T_{n,\alpha;m,\beta}^- := i \frac{\hbar}{T} \langle \psi_{\epsilon,n,\alpha}^- | (u u_0^{-1} - \mathbf{1}) \psi_{\epsilon,m,\beta}^0 \rangle. \quad (2.62)$$

Die Herleitung dieser Ausdrücke ist in Anhang B.2 zu finden. Die Matrixelemente der S-Matrix aus Gleichung (2.60) sind proportional zu  $\delta(\epsilon - \epsilon')$ . Diese

Eigenschaft drückt die Erhaltung der Quasienergie bei der Streuung an zeitlich periodischen Potentialen aus. Für die Beschreibung eines realistischen Streuprozesses mit Hilfe von normierbaren, asymptotisch freien Wellenpaketen hat die Quasienergieerhaltung die folgenden Auswirkungen: Der Überlapp des einlaufenden Wellenpakets mit dem Wechselwirkungsbereich ist (in “früher” Vergangenheit) vernachlässigbar klein, daher kann dem einlaufenden Teilchen eine wohldefinierte Energie zugeordnet werden. Der Überlapp der auslaufenden Wellenpakete mit dem Wechselwirkungsbereich ist (in “ferner” Zukunft) ebenfalls vernachlässigbar. Die Energie der auslaufenden Pakete ist daher auch wohldefiniert, sie kann sich aber aufgrund der Quasienergieerhaltung von der Energie des einlaufenden Teilchens um ganzzahlige Vielfache von  $\hbar\omega$  unterscheiden. Handelt es sich bei dem zeitabhängigen Teil des Streupotentials zum Beispiel um ein (klassisches) zeitperiodisches Strahlungsfeld, so wird eine Differenz von  $n\hbar\omega$  zwischen auslaufender und einlaufender Energie als Absorption ( $n > 0$ ) bzw. Emission ( $n < 0$ ) von  $|n|$  Photonen im Laufe des Streuprozesses interpretiert. Durch das Einschalten eines zeitperiodischen Potentials werden also neue, zusätzliche Streukanäle, die *Floquetmoden*, geöffnet.

Es sei noch angemerkt, daß für zeitunabhängige Systeme die Eigenschaft  $H(t+T) = H(t)$  für beliebige  $T$  zutrifft. Betrachtet man ein zeitunabhängiges System als zeitperiodisch mit der Periode  $T > 0$ , so müssen im Limes  $T \rightarrow 0$  die gerade vorgestellten Ausdrücke gegen die entsprechenden Beziehungen der Streutheorie zeitunabhängiger Systeme konvergieren. Dies ist der Fall, wie in Anhang B.3 gezeigt wird.

Die Streuung an einem zeitperiodischen Potential kann natürlich auch im Rahmen der zeitabhängigen Streutheorie beschrieben werden. Aufgrund der asymptotischen Freiheit der ein- und auslaufenden Zustände gelten die Beziehungen (2.24),

$$|\psi(-t)\rangle \sim U_0(-t)|\psi_{\text{ein}}\rangle \quad \text{und} \quad |\psi(t)\rangle \sim U_0(t)|\psi_{\text{aus}}\rangle \quad \text{für } t \rightarrow \infty,$$

auch im Falle zeitabhängiger Potentiale. Die Zustände  $|\psi_{\text{ein}}\rangle$  und  $|\psi_{\text{aus}}\rangle$  beziehen sich beide auf den Zeitpunkt  $t = 0$  (vgl. Gleichung (2.25) auf Seite 32). Es soll die Frage untersucht werden, wie sich eine Verschiebung des zeitlichen Bezugspunktes von  $t = 0$  auf  $t = t_0$ ,  $|t_0| < \infty$ , auswirkt. Für zeitunabhängige Potentiale darf diese Verschiebung keinerlei Auswirkung haben. Für zeitperiodische Potentiale jedoch liegt die anschauliche Bedeutung der Verschiebung darin, daß das einlaufende Teilchen den Wechselwirkungsbereich zu einer an-

deren Phasenlage des Potentials erreicht, was zu verschiedenen auslaufenden Zuständen führen kann.

Sowohl für zeitunabhängige als auch für zeitperiodische Streusysteme gilt  $|\psi_{\text{aus}}\rangle = S|\psi_{\text{ein}}\rangle$ . Die Zeitentwicklung von  $|\psi_{\text{ein}}(t)\rangle$  und  $|\psi_{\text{aus}}(t)\rangle$  ist durch

$$|\psi_{\text{ein}}(t_0)\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_0t_0\right\}|\psi_{\text{ein}}\rangle \quad , \quad |\psi_{\text{aus}}(t_0)\rangle = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}H_0t_0\right\}|\psi_{\text{aus}}\rangle$$

gegeben. Damit folgt für die S-Matrix mit  $U_0(t_0) = \exp(-iH_0t_0/\hbar)$

$$|\psi_{\text{aus}}(t_0)\rangle = U_0(t_0)S|\psi_{\text{ein}}\rangle = \tilde{S}|\psi_{\text{ein}}(t_0)\rangle.$$

Die S-Matrix für den verschobenen zeitlichen Bezugspunkt  $t_0$  lautet somit

$$\tilde{S} := U_0(t_0)SU_0^\dagger(t_0). \quad (2.63)$$

Für zeitunabhängige Systeme folgt mit  $[S, H_0]$

$$[S, U_0(t_0)] = 0 \quad \Rightarrow \quad \tilde{S} = S, \quad (2.64)$$

und  $\tilde{S}$  hängt nicht vom zeitlichen Bezugspunkt  $t_0$  ab.

In zeitperiodischen Systemen gilt

$$u\Omega_\pm = \Omega_\pm u_0, \quad (2.65)$$

wie sich mit Hilfe der Definition (2.53) der Mølleroperatoren leicht zeigen läßt. Daraus folgt  $[S, u_0] = 0$ , was die Quasienergieerhaltung widerspiegelt. Für  $t_0 \neq nT$  und mit

$$U(t_0, 0) := \mathcal{T} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_0} dt' H(t')\right\}$$

ist jedoch aufgrund der Eigenschaft (2.49) des Zeitentwicklungsoperators eines zeitperiodischen Systems

$$U(t_0, 0)\Omega_\pm \neq \Omega_\pm U_0(t_0). \quad (2.66)$$

Somit vertauschen die S-Matrix  $S$  und  $U_0(t_0)$  nicht, und es gilt (siehe auch [59])

$$\tilde{S} = U_0(t_0)SU_0^\dagger(t_0) \neq S. \quad (2.67)$$

Die Eigenphasen der beiden unitären Matrizen  $S$  und  $\tilde{S}$  sind jedoch gleich, da sie über eine unitäre Transformation verknüpft sind. Sie haben auch dieselben Pole, daher liefern sie dieselben Resonanzen mit denselben Breiten.

### Charakteristika zeitperiodischer Streusysteme

Die wichtigsten Charakteristika der Streuung an zeitunabhängigen und an zeitlich periodischen Potentialen sollen schließlich noch zusammenfassend gegenübergestellt werden:

Zeitunabhängige Streusysteme	Zeitlich periodische Streusysteme
Energieerhaltung	Quasienergieerhaltung
S-Matrix: $S_{\mu;\nu}$ $\mu, \nu$ : Streukanäle	S-Matrix: $S_{\mu,m;\nu,n}$ $\mu, \nu$ : Streukanäle $m, n$ : Floquetmoden
Energien des aus- und einlaufenden Teilchens: $E_{\text{aus}} = E_{\text{ein}}$	Energien des aus- und einlaufenden Teilchens: $E_{\text{aus}} = E_{\text{ein}} + k\hbar\omega$ $k = m - n$ ganzzahlig $\omega = 2\pi/T$ : Frequenz des Potentials

Tabelle 2.2: Vergleich zeitunabhängiger und zeitperiodischer Streusysteme

Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß die Streuung an einem zeitperiodischen Potential bezüglich der Quasienergieerhaltung immer elastisch ist, während sie bezüglich der Energieerhaltung im allgemeinen inelastisch ist.

Die Konsequenzen der Eigenschaften beliebiger zeitperiodischer Streusysteme werden nun diskutiert. Dabei wird von eindimensionalen zeitlich periodischen Potentialen ausgegangen, da im weiteren Verlauf solche Systeme genauer untersucht werden. Die diskutierten Eigenschaften sowie die erhaltenen Ergebnisse lassen sich jedoch auf Systeme höherer Dimensionalität verallgemeinern.

Wie für den allgemeinen Fall gezeigt, führt die Erhaltung der Quasienergie bei der Streuung an eindimensionalen zeitlich periodischen Potentialen dazu, daß sich die Energien des einlaufenden und auslaufenden Teilchens nur um ganzzahlige Vielfache von  $\hbar\omega$  unterscheiden können. Eine solche Situation ist in Abbildung 2.3 skizziert. Ein mit der Energie  $E$  einlaufendes Teilchen hat auslaufende Zustände mit den Energien  $E + n\hbar\omega$  zur Folge. Außerhalb

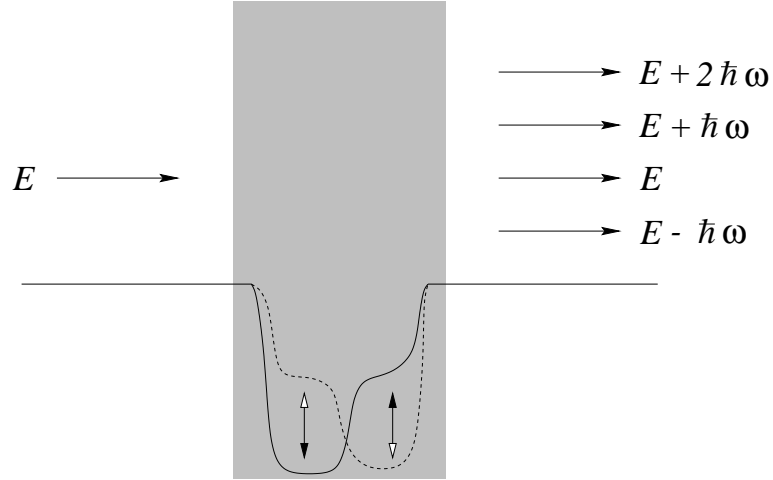


Abbildung 2.3: Streuung an einem eindimensionalen zeitperiodischen Potential: Die einlaufende Energie  $E$  führt zu auslaufenden Zuständen mit den Energien  $E + n\hbar\omega$ , wie hier für die Transmission skizziert. Der Wechselwirkungsbereich ist grau unterlegt.

des Wechselwirkungsbereichs bewegt sich das Teilchen frei. Aus Gründen der Übersichtlichkeit ist dies in Abbildung 2.3 nur für die Transmission skizziert.

Ist die Frequenz  $\omega$  der Oszillation des Potentials groß genug, so ist zu erwarten, daß in der Streuung Charakteristika des zeitgemittelten Potentials

$$\bar{V}(x) := \frac{1}{T} \int_0^T dt' V(x, t') \quad (2.68)$$

erkennbar sind. Das zeitgemittelte Potential wird in diesem *adiabatischen Grenzfall* als *effektives Potential* im folgenden Sinne fungieren: Besitzt das effektive Potential

$$V_{\text{eff}}(x) = \bar{V}(x) \quad (2.69)$$

gebundene Zustände bei den Energien  $E_n < 0$ , so kann ein mit der Energie  $E = E_{n,m} := E_n + m\hbar\omega > 0$  einlaufendes Teilchen aufgrund der periodischen Zeitabhängigkeit des Potentials  $V(x, t)$  die Energie von  $m \in \mathbb{Z}$  Photonen abgeben und im  $n$ -ten *quasigebundenen Zustand* für eine längere, aber endliche Zeit gefangen werden. Für einlaufende Energien  $E = E_{n,m}$  sind also Resonanzen zu erwarten, da die gebundenen Zustände des effektiven Potentials wegen der periodischen Zeitabhängigkeit des Potentials  $V(x, t)$  an das Kontinuum

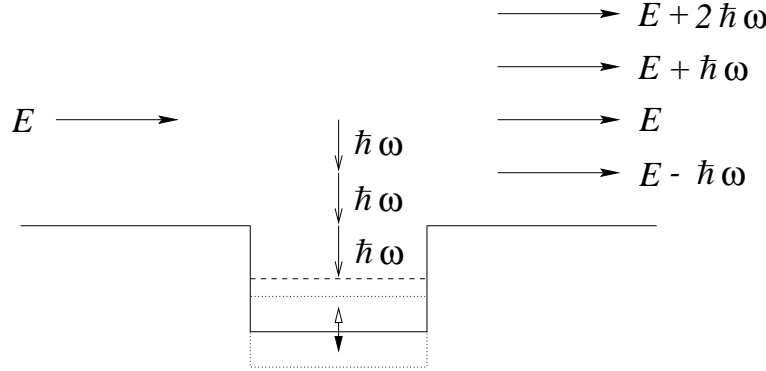


Abbildung 2.4: Rechteckförmiges, effektives Potential mit einem gebundenen Zustand (gestrichelte Linie) für einen Rechtecktopf mit oszillierendem Boden (punktierte Linien: oberer bzw. unterer Umkehrpunkt) im adiabatischen Grenzfall. Die Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens erfüllt die Resonanzbedingung  $E = E_{0,3}$ .

koppeln. Diese Situation ist in Abbildung 2.4 für ein rechteckförmiges Potential mit vertikal oszillierendem Boden skizziert. Das effektive Potential ist ebenfalls rechteckförmig, es besitzt in diesem Fall einen gebundenen Zustand bei der Energie  $E_0$ , so daß die Resonanzbedingung  $E = E_{0,m}$  lautet.

Ist hingegen die Frequenz  $\omega$  des zeitperiodischen Potentials  $V(x, t)$  sehr klein, so “sieht” ein sich im Wechselwirkungsbereich aufhaltendes Teilchen zu jedem Zeitpunkt das jeweils instantane Potential. Ändert sich die Form des Potential  $V(x, t)$  nicht oder nur wenig im Verlauf einer Periode, wie z. B. im Falle lateral oszillierender Potentiale oder für Potentiale, deren Boden mit sehr kleiner Amplitude vertikal oszilliert, so ändern sich die Energien der gebundenen Zustände in den jeweils instantanen Potentialen nur wenig. Das effektive Potential  $V_{\text{eff}}(x)$  ist in diesem *adiabatischen Grenzfall* von der Form der instantanen Potentiale. Die gebundenen Zustände des effektiven Potentials führen genauso wie im adiabatischen Fall zu Resonanzen.

Eine obere Grenzfrequenz  $\omega_{\text{ad}}$  für das Eintreten des adiabatischen Grenzfalls läßt sich folgendermaßen grob abschätzen: Ein im durch das instantane Potential gegebenen, effektiven Potential gefangenes Teilchen muß im Verlauf einer Periode des zeitabhängigen Potentials  $V(x, t)$  genügend “Zeit haben”, den Wechselwirkungsbereich zu durchlaufen. Die Energie eines “in Resonanz” gefangenen Teilchens ist durch die Energie eines der gebundenen Zustände im effektiven Potential gegeben. Die Energie des Teilchens sei  $E$  und es sei

$\omega_{\text{kl}} = 2\pi/T_{\text{kl}}$  die Frequenz eines gefangenen klassischen Teilchens, das sich im effektiven Potential mit der Gesamtenergie  $E$  oszillatorisch bewegt. Ist die Frequenz  $\omega$  des Potentials  $V(x, t)$  deutlich kleiner als  $\omega_{\text{ad}} \sim \omega_{\text{kl}}$ , so tritt der adiabatische Grenzfall ein. Ist  $\omega$  hingegen deutlich größer als  $\omega_{\text{ad}}$ , so ist der diabatische Bereich erreicht.

Das Auftreten eines adiabatischen bzw. diabatischen Grenzfalls in der Streuung an zeitperiodischen Potentialen für ausreichend kleine bzw. große Frequenzen wurde auch in Referenz [119] gefunden. Hier wurde die Streuung an oszillierenden Tunnelbarrieren untersucht und es konnte gezeigt werden, daß eine Beschreibung mit Hilfe eines effektiven Potentials möglich ist.

### 2.2.3 Eindimensionale zeitperiodische Streusysteme

Die Beschreibung eines konkreten Streusystems kann im Prinzip mit Hilfe verschiedener Methoden erfolgen. Eine direkte Verwendung der Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen ist jedoch in vielen Fällen nur schwer durchführbar. Eine praktische Methode, die zudem bezüglich der genauen Form des Potentials nur wenigen Einschränkungen unterliegt und daher auch hier Anwendung findet, besteht in der Verfolgung der zeitlichen Entwicklung von Wellenpaketen, die am betrachteten Potential gestreut werden. Dabei muß der Zeitentwicklungsoperator im allgemeinen numerisch berechnet werden. Eine in diesem Zusammenhang weit verbreitete Methode ist das *Split-Operator-Verfahren* [94]. Diese Vorgehensweise wurde von Pimpale *et. al.* verwendet, um die Streuung an vertikal bzw. lateral oszillierenden, gaußförmigen Tunnelbarrieren zu untersuchen [119].

Für den Spezialfall *stückweise konstanter* Potentiale, die entweder vertikal oszillierende Teilbereiche besitzen oder einem wechselstromartigen Antrieb unterworfen sind, kann die Streuung auch mit Hilfe der *Transfermatrixmethode* beschrieben werden [65–69]. Dabei kann die Quasienergieerhaltung bei der Streuung ausgenutzt werden. Eine Verallgemeinerung dieser Methode auf beliebige, eindimensionale zeitperiodische Streupotentiale ist jedoch nicht möglich. In [64, 70, 71] sind der Transfermatrixmethode verwandte Methoden vorgestellt worden. Auch diese Methoden sind nur auf stückweise konstante Potentiale anwendbar.

In diesem und den folgenden Abschnitten wird die für die spätere Untersuchung eindimensionaler zeitperiodischer Streusysteme entwickelte Methode ausführlich vorgestellt. Zunächst wird die Funktionsweise der Methode skizziert, und es werden den Streuprozess charakterisierende Größen definiert, die



in der späteren Anwendung berechnet werden. In den Abschnitten 2.2.4 und 2.2.5 werden die  $(t, t')$ -Methode zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators bzw. die Kramers-Henneberger-Transformation behandelt, da beide Konzepte eine fundamentale Rolle bei der Umsetzung der Methode spielen. Abschnitt 2.2.6 enthält schließlich eine detaillierte Beschreibung der *Wellenpaketpropagationsmethode*.

Zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators wird hier die  $(t, t')$ -Methode verwendet, da diese auf der Floquettheorie aufbaut und daher die zeitliche Periodizität des Potentials in vollem Umfang berücksichtigt wird (siehe Abschnitt 2.2.4). Das Split-Operator-Verfahren hingegen ist im Prinzip für Systeme mit beliebiger Zeitabhängigkeit geeignet, und die zeitliche Periodizität wird nicht vollständig ausgenutzt [94].

Von einer direkten Verwendung der Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen (2.58) wurde abgesehen, da keine Basis gefunden werden konnte, mit deren Hilfe für beliebige eindimensionale zeitperiodische Potentiale eine Berechnung auf der Quasienergieschale möglich ist.

Die Streuung an einem eindimensionalen zeitlich periodischen Potential wird mit Hilfe des Verfolgens der zeitlichen Entwicklung von Wellenpaketen untersucht. Dazu wird die Zeitentwicklung gaußförmiger Wellenpakete, deren Überlapp mit dem Wechselwirkungsbereich des Potentials zu Beginn vernachlässigbar klein ist, stroboskopisch verfolgt. Ausgenutzt wird dabei die für zeitlich periodische Systeme existierende diskrete, quantenmechanische Abbildung (siehe Gleichung (2.47) auf Seite 36), die durch den Zeitentwicklungsoperator über eine Periode erzeugt wird. Aufgrund der Eigenschaft (2.47) des Zeitentwicklungsoperators kann die zeitliche Entwicklung eines Zustandes  $|\Psi(t)\rangle$  zu den Zeiten  $t = jT$ , wobei  $T$  die Periode des zeitabhängigen Potentials ist und  $j \in \mathbb{N}$ , durch  $j$ -maliges Anwenden des Zeitentwicklungsoperators über eine Periode  $U(T, 0)$  berechnet werden. Somit genügt es, den Operator  $U(T, 0)$  einmal zu berechnen, um die Zeitentwicklung stroboskopisch solange zu verfolgen, bis der jeweilige in der Zeit propagierte Zustand sich wie ein asymptotisch freier, auslaufender Zustand verhält und sein Überlapp mit dem Wechselwirkungsbereich wieder vernachlässigbar klein geworden ist. Zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators  $U(T, 0)$  wird die  $(t, t')$ -Methode verwendet, die in Abschnitt 2.2.4 vorgestellt wird.

Um die Streuung zu charakterisieren, werden folgende Größen betrachtet:

- totale Transmission und Reflexion,
- partielle Transmission und Reflexion,

- effektive Aufenthaltszeit.

Die Transmission bzw. Reflexion ist hier, so wie in eindimensionalen zeitunabhängigen Systemen allgemein üblich [53, 115], als das Verhältnis des transmittierten bzw. reflektierten Flusses bezogen auf den gesamten einlaufenden Fluß definiert. Die genauen Definitionen lauten dabei wie folgt: Die *partielle Transmission*  $T_l(E)$  (*Reflexion*  $R_l(E)$ ) ist durch das Verhältnis des transmittierten (reflektierten) Flusses mit der auslaufenden Energie  $E' = E + l\hbar\omega$  ( $l \in \mathbb{Z}$ ) bezogen auf den gesamten, mit der Energie  $E$  einlaufenden Fluß gegeben. Die *totale Transmission*  $T_{\text{tot}}(E)$  (*Reflexion*  $R_{\text{tot}}(E)$ ) ist durch die Summe aller partiellen Transmissionen (Reflexionen) gegeben,

$$T_{\text{tot}}(E) := \sum_{l \in \mathbb{Z}} T_l(E) \quad , \quad R_{\text{tot}}(E) := \sum_{l \in \mathbb{Z}} R_l(E). \quad (2.70)$$

Mit diesen Definitionen gilt stets

$$T_{\text{tot}}(E) + R_{\text{tot}}(E) = 1 \quad , \quad \forall E > 0, \quad (2.71)$$

$$T_l(E) = R_l(E) = 0 \quad \text{für } E' = E + l\hbar\omega < 0. \quad (2.72)$$

Die auf diese Weise definierte Transmission bzw. Reflexion läßt sich mit der S-Matrix in Verbindung setzen. Als Basis werden ebene Wellen verwendet:

$$\begin{aligned} \langle x | \psi_{\epsilon, n, \pm}^0 \rangle &\propto e^{\pm i k_n(\epsilon) x}, \\ k_n(\epsilon) &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(\epsilon + n\hbar\omega)}. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Aufgrund der Quasienergieerhaltung kann die S-Matrix in dieser Basis als

$$\langle \psi_{\epsilon, n, \pm}^0 | S | \psi_{\epsilon', n', \mp}^0 \rangle = S_{n, n'}^{\pm, \mp}(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon') \quad (2.74)$$

geschrieben werden (siehe auch Gleichung (2.60) auf Seite 40 und [82]). Für räumlich symmetrische Potentiale mit  $V(-x, t) = V(x, t)$  gilt

$$S_{n, n'}^+(\epsilon) := S_{n, n'}^{+, -}(\epsilon) = S_{n, n'}^{-, +}(\epsilon), \quad (2.75)$$

$$S_{n, n'}^-(\epsilon) := S_{n, n'}^{+, +}(\epsilon) = S_{n, n'}^{-, -}(\epsilon). \quad (2.76)$$

Die partielle Transmission bzw. Reflexion sind schließlich durch

$$T_l(E) = |S_{n, n'}^+(\epsilon)|^2 \quad \text{mit } E = \epsilon + n'\hbar\omega, \quad l = n - n', \quad (2.77)$$

$$R_l(E) = |S_{n, n'}^-(\epsilon)|^2 \quad \text{mit } E = \epsilon + n'\hbar\omega, \quad l = n - n'. \quad (2.78)$$

gegeben [82]. Die totale Transmission und Reflexion ist weiterhin über Gleichung (2.70) definiert. Diese Relation zwischen Transmission bzw. Reflexion und S-Matrix ist eine Verallgemeinerung der für eindimensionale zeitunabhängige Systeme üblichen Definitionen [53, 115].

Mit den Definitionen (2.77) und (2.78) sind die partiellen und totalen Transmissionen und Reflexionen unabhängig von der Wahl des zeitlichen Bezugspunktes zur Beschreibung der Streuung, wie nun gezeigt werden soll. Die Wahl des zeitlichen Bezugspunktes wurde schon bei der Diskussion der Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen, Seite 40 ff., behandelt. Dabei ergab sich, daß sich die S-Matrizen für zwei verschiedene zeitliche Bezugspunkte im allgemeinen unterscheiden, sie jedoch über eine unitäre Transformation miteinander verbunden sind (siehe Gleichung (2.67), Seite 42). Wird der zeitliche Bezugspunkt von  $t = 0$  auf  $t = t_0 \neq jT$  ( $j \in \mathbb{Z}$ ) geändert, so erhält man mit Gleichung (2.67) und unter Beachtung der Tatsache, daß die Basisvektoren  $|\psi_{\epsilon,n,\pm}^0\rangle$  Eigenvektoren des freien Hamiltonoperators und damit auch der freien Zeitentwicklung sind,

$$\langle \psi_{\epsilon,n,\pm}^0 | U_0(t_0) S U_0^\dagger(t_0) | \psi_{\epsilon',n',\mp}^0 \rangle = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (n' - n) \hbar \omega t_0 \right\} S_{n,n'}^{\pm,\mp}(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon').$$

Das Betragsquadrat des in die Transmission eingehenden Matrixelements der S-Matrix ändert sich nicht, somit sind auch die partiellen und die totalen Transmissionen bzw. Reflexionen unabhängig von der Wahl des zeitlichen Bezugspunktes  $t_0$ . Die Unabhängigkeit der Transmission bzw. Reflexion von  $t_0$  war zu erwarten, da es sich bei den in der Definition verwendeten ebenen Wellen um Zustände mit zeitlich konstantem Fluß handelt.

Werden hingegen bei der Berechnung der Transmission bzw. Reflexion die Elemente der Streumatrix  $S$  zwischen Wellenpaketen genommen, so kann das Ergebnis durchaus von  $t_0$  abhängen. Verwendet man zur Berechnung der Transmission bzw. Reflexion jedoch Wellenpakete mit der Ortsunschärfe  $\Delta x$ , mittlerem Impuls  $p$  und minimaler Unschärfe  $\Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$ , so sind die auf diese Weise berechneten Größen unabhängig von der Wahl des zeitlichen Bezugspunktes  $t_0$ , falls die Zeit  $\Delta \tau$ , in der das Wellenpaket die Strecke  $\Delta x$  zurücklegt, deutlich größer ist als die Periode  $T$  des zeitabhängigen Streupotentials  $V(x, t)$ ,

$$\Delta \tau := \frac{m \Delta x}{p} \gg T, \quad (2.79)$$

wobei  $m$  die Masse des Teilchens bezeichnet. Anschaulich läßt sich diese Bedingung so verstehen, daß ein einlaufendes Wellenpaket, für das die Be-

dingung (2.79) nicht erfüllt ist, beim Eintritt in den Wechselwirkungsbereich nicht alle Phasenlagen des zeitperiodischen Potentials  $V(x, t)$  “sieht” und somit der auslaufende Zustand von der Phasenlage von  $V(x, t)$  beim Eintritt des Wellenpakets in den Wechselwirkungsbereich abhängen muß. Ist die Bedingung (2.79) erfüllt, so werden alle Phasenlagen des Potentials vom einlaufenden Wellenpaket erfaßt und die gemäß der Definition der Transmission bzw. Reflexion gewünschte Mittelung über alle Phasenlagen, die einer Mittelung über alle  $t_0$  im Intervall  $[0, T]$  entspricht, erfolgt automatisch.

Die *effektive Aufenthaltszeit* ist als der stroboskopisch zeitintegrierte Überlapp mit dem Wechselwirkungsbereich eines am zeitperiodischen Potential  $V(x, t)$  gestreuten Wellenpakets, skaliert mit der Anfangsgeschwindigkeit des Wellenpakets, definiert. Sei  $\Psi(x, t = 0)$  die Wellenfunktion des einlaufenden Wellenpakets, dessen Überlapp mit dem Wechselwirkungsbereich vernachlässigbar klein ist, und  $v$  die Gruppengeschwindigkeit des Pakets  $\Psi(x, t = 0)$ . Die effektive Aufenthaltszeit ist proportional zu  $W$  mit

$$W := v \sum_{j=0}^{\infty} \int_{-\Lambda}^{\Lambda} dx |\Psi(x, t = jT)|^2, \quad (2.80)$$

wobei der Wechselwirkungsbereich durch das Intervall  $[-\Lambda, \Lambda]$  gegeben sei. Die Größe  $W$ , die im weiteren Verlauf als effektive Aufenthaltszeit bezeichnet wird, ist ein effizientes Hilfsmittel zur Detektion von Resonanzen, so wie sie z. B. für den adiabatischen bzw. diabatischen Grenzfall der Streuung an einem zeitlich periodischen Potential zu erwarten sind. Diese Resonanzen sind als Maxima in der effektiven Aufenthaltszeit erkennbar. Aufgrund der asymptotischen Freiheit ein- und auslaufender Zustände läßt sich  $W$ , zumindest in guter Näherung, mit Hilfe einer endlichen Summe berechnen.

Eine Berechnung der S-Matrix mittels der entsprechenden Analyse des einlaufenden und der auslaufenden Wellenpakete ist im Prinzip auch möglich. Wir beschränken uns hier jedoch auf die Berechnung der oben definierten Transmissionen bzw. Reflexionen sowie der effektiven Aufenthaltszeit, da die in den Kapiteln 3 und 4 zu betrachtenden Streusysteme mit diesen Größen im Rahmen der durchzuführenden Untersuchungen hinreichend beschreibbar sind.

Es ist an dieser Stelle anzumerken, daß in der Literatur bei der Behandlung verwandter physikalischer Systeme neben der Transmission bzw. Reflexion oder der effektiven Aufenthaltszeit auch weitere Größen betrachtet werden. So wurden z. B. in Referenz [120] die spektralen Gewichte der Wel-

lenfunktion in einem zeitperiodischem Potential betrachtet.

### 2.2.4 Die $(t, t')$ -Methode zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators

Die im letzten Abschnitt beschriebene zeitliche Propagation von Wellenpaketen zur Untersuchung der Streuung an eindimensionalen zeitlich periodischen Potentialen ist natürlich nur möglich, wenn der Zeitentwicklungsoperator bekannt ist. Genügt es, die zeitliche Evolution des Systems stroboskopisch zu verfolgen, so wie es in den hier betrachteten Systemen der Fall ist, so ist es ausreichend, den Zeitentwicklungsoperator über eine Periode ein einziges Mal zu berechnen, um ihn dann mehrmals anzuwenden, wie schon kurz in Abschnitt 2.2.2 bei der Einführung der diskreten, quantenmechanischen Abbildung (2.47), Seite 36, beschrieben. Ebenfalls in der kurzen Zusammenfassung der Floquettheorie, Seite 34 ff., hatten wir gesehen, daß der gesuchte Zeitentwicklungsoperator eines zeitperiodischen Systems durch

$$U(t, t_0) = \mathsf{T} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t') \right\}$$

gegeben ist, wobei  $\mathsf{T}$  für die Zeitordnung von Operatoren steht. Der gesuchte Operator ist also *nicht* durch die einfache Exponentialfunktion des Hamiltonoperators  $H$  gegeben, was seine Berechnung deutlich erschwert.

Die  $(t, t')$ -Methode stellt einen auf der Floquettheorie basierenden Algorithmus dar, mit dessen Hilfe die Berechnung des Zeitentwicklungsoperators eines zeitperiodischen Systems auf effiziente Weise erfolgen kann. Peskin und Moiseyev führten die  $(t, t')$ -Methode ein [93], die auf einer Idee von Pfeifer und Levine [121] basiert. Eine Zusammenfassung der Vorgehensweise kann auch in [1, 2] gefunden werden.

Das im Rahmen der Floquettheorie eingeführte Konzept des erweiterten Hilbertraums (siehe Seite 34 ff.) und die Tatsache, daß ein so transformiertes System formal zeitunabhängig ist, stellen die Grundlage der  $(t, t')$ -Methode dar. Die Struktur des Zeitentwicklungsoperators im erweiterten Hilbertraum ist somit bekannt und durch die Exponentialfunktion des Hamiltonoperators gegeben. Die Effizienz der  $(t, t')$ -Methode liegt im “geschickten Herauslesen” des Zeitentwicklungsoperators im ursprünglichen Hilbertraum aus den für das betrachtete Problem relevanten Teilen des Zeitentwicklungsoperators im erweiterten Hilbertraum. Die Methode wird nun detailliert vorgestellt.

Sie kommt im Rahmen der Umsetzung der Wellenpaketpropagationsmethode zum Einsatz.

Die  $(t, t')$ -Methode wird für räumlich eindimensionale zeitperiodische Systeme erläutert. Eine Verallgemeinerung auf Systeme beliebiger Dimensionalität ist leicht möglich. Es gilt, die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$H(x; t)\psi(x; t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(x; t) \quad (2.81)$$

zu lösen. Der zeitabhängige Hamiltonoperator  $H(x; t)$  wirkt dabei im Hilbertraum  $\mathcal{R}$  der quadratintegrablen Funktionen auf  $\mathbb{R}$  (siehe auch Abschnitt 2.2.2, Seite 34 ff.). Der gesuchte Zeitentwicklungsoperator  $U(t, t_0)$  liefert wie üblich die zeitabhängige Lösung  $\psi(x; t)$  für den Anfangszustand  $\psi(x; t_0)$ ,

$$\psi(x; t) = U(t, t_0)\psi(x; t_0). \quad (2.82)$$

In der kurzen Zusammenfassung der Floquettheorie, Seite 34 ff., wurde weiterhin gezeigt, daß mittels der Einführung des erweiterten Hilbertraums  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  das betrachtete zeitperiodische System in ein zeitunabhängiges höherer Dimensionalität transformiert werden kann (siehe Gleichungen (2.38) und (2.39) und die nachfolgenden Betrachtungen, Seite 35 ff.). Es bezeichne  $\mathcal{T}$  den Hilbertraum der  $T$ -periodischen Funktionen auf dem Intervall  $[0, T]$ , wobei  $T$  die Periode des durch  $H(x; t)$  beschriebenen Systems ist. Der Hamiltonoperator im erweiterten Hilbertraum werde mit  $\mathcal{H}(x, t')$  bezeichnet und  $t' \in [0, T]$  sei die “neue” Koordinate. Für  $t' > T$  sei  $t' \bmod T$  definiert. Die Zeit wird durchgehend mit  $t$  bezeichnet.  $\mathcal{H}(x, t')$  ist durch

$$\mathcal{H}(x, t') := H(x; t = t') - i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \quad (2.83)$$

gegeben, und die zeitabhängige Schrödingergleichung im erweiterten Hilbertraum sowie der zu  $\mathcal{H}(x, t')$  gehörige Zeitentwicklungsoperator  $\mathcal{U}(t, t_0)$  lauten

$$\mathcal{H}(x, t')\Psi(x, t'; t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t'; t), \quad (2.84)$$

$$\Psi(x, t'; t) = \mathcal{U}(t, t_0)\Psi(x, t'; t_0), \quad (2.85)$$

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \mathcal{U}(t - t_0) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(x, t')(t - t_0) \right\}. \quad (2.86)$$

Die gesuchte Lösung  $\psi(x; t) \in \mathcal{R}$  läßt sich aus der Lösung  $\Psi(x, t'; t) \in \mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  gewinnen. Unter Benutzung der obigen Relationen erhält man

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t'; t) = \mathcal{H}(x, t')\mathcal{U}(t - t_0)\Psi(x, t'; t_0)$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \Psi(x, t'; t) + H(x; t = t') \Psi(x, t'; t).$$

Somit gilt

$$i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t'} \right) \Psi(x, t'; t) = H(x; t = t') \Psi(x, t'; t). \quad (2.87)$$

Mit  $t' = t$  ist  $(\partial t' / \partial t) = 1$  und man erhält

$$\left. \frac{\partial}{\partial t'} \Psi(x, t'; t) \right|_{t'=t} + \left. \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t'; t) \right|_{t'=t} = \frac{\partial}{\partial t} \psi(x; t), \quad (2.88)$$

was unter Berücksichtigung von Gleichung (2.81) schließlich auf das gewünschte Ergebnis

$$\psi(x; t) = \Psi(x, t'; t)|_{t'=t} \quad (2.89)$$

führt. Diese Beziehung gilt für alle  $t \in \mathbb{R}$ .

Mit Hilfe der letzten Relation kann der gesuchte Zeitentwicklungsoperator  $U(t, t_0)$  in  $\mathcal{R}$  “über den Umweg” der Transformation auf den erweiterten Hilbertraum  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$ , aber unter Ausnutzung der einfachen Struktur (2.86) des Zeitpropagators  $\mathcal{U}(t - t_0)$ , bestimmt werden.

Eine vollständige, orthonormierte Basis des Raums  $\mathcal{T}$  ist durch

$$f_n(t') := \exp(in\omega t') \quad , \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2.90)$$

gegeben. Dabei ist  $\omega = 2\pi/T$ , und das Skalarprodukt in  $\mathcal{T}$  ist durch (2.42), Seite 36, gegeben. In dieser Basis können sowohl der Zeitentwicklungsoperator  $\mathcal{U}(t - t_0)$  entwickelt werden,

$$\mathcal{U}(t - t_0) = \sum_{n, n' \in \mathbb{Z}} |n\rangle \langle n'| \mathcal{U}_{n, n'}(t - t_0), \quad (2.91)$$

als auch die Wellenfunktion  $\Psi$ ,

$$\Psi(x, t'; t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi_n(x; t) f_n(t'), \quad (2.92)$$

wobei für  $t = t_0$  eine analoge Formel gilt. Die “Koeffizienten”  $\phi_n(x; t)$  (und  $\phi_n(x; t_0)$  für den Fall  $t = t_0$ ) sind Elemente des Raums  $\mathcal{R}$  und die “Matrixelemente”  $\mathcal{U}_{n, n'}(t - t_0)$  sind Operatoren, die ebenfalls (in einer Kopie) von  $\mathcal{R}$  wirken.

Die Zeitentwicklung der  $\phi_n(x; t)$  ergibt sich aus Gleichung (2.85) und den Zerlegungen (2.91) und (2.92) zu

$$\phi_n(x; t) = \sum_{n'=-\infty}^{\infty} \mathcal{U}_{n,n'}(t - t_0) \phi_{n'}(x; t_0). \quad (2.93)$$

Gleichung (2.89) gilt natürlich auch für den Anfangszeitpunkt  $t_0$ . Da uns an dieser Stelle nur die Zeitentwicklung der Zustände aus  $\mathcal{R}$  interessiert, kann der Anfangszustand im erweiterten Hilbertraum ohne Beschränkung der Allgemeinheit als

$$\Psi(x, t'; t_0) = \phi_0(x; t_0) = \psi(x; t_0), \quad (2.94)$$

also als  $t'$ -unabhängig, angesetzt werden. Die Zerlegung (2.92) und Gleichung (2.93) sowie wiederum die Beziehung (2.89) führen auf

$$\psi(x; t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n(t' = t) \mathcal{U}_{n,0}(t - t_0) \phi_0(x; t_0).$$

Unter Berücksichtigung der letzten Gleichheit in (2.94) und von Gleichung (2.82) erhält man schließlich das gewünschte Ergebnis

$$U(t, t_0) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\omega t} \mathcal{U}_{n,0}(t - t_0). \quad (2.95)$$

Der Zeitentwicklungsoperator in  $\mathcal{R}$  ist somit durch eine Summe der in  $\mathcal{R}$  wirkenden Matricelemente  $\mathcal{U}_{n,0}(t - t_0)$  des Zeitentwicklungsoperators in  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  gegeben. Die  $\mathcal{U}_{n,0}(t - t_0)$  sind also die für  $U(t, t_0)$  relevanten Anteile des Zeitentwicklungsoperators in  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$ , alle weiteren Matricelemente von  $\mathcal{U}$  sind für die Berechnung von  $U(t, t_0)$  irrelevant.

Für die später durchzuführende stroboskopische Zeitpropagation muß der Zeitentwicklungsoperator  $U(T, 0)$  über eine Periode berechnet werden. Zerlegt man das Zeitintervall  $[0, T]$  in  $N \in \mathbb{N}$  kleine Intervalle der Länge  $\Delta t = T/N$ , so gilt

$$U(T, 0) = U(N\Delta t, (N-1)\Delta t) U((N-1)\Delta t, (N-2)\Delta t) \cdots U(\Delta t, 0). \quad (2.96)$$

Für jeden einzelnen dieser Zeitpropagatoren gilt für  $k \in \{1, 2, \dots, N\}$

$$U(k\Delta t, (k-1)\Delta t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\omega k\Delta t} \mathcal{U}_{n,0}(\Delta t). \quad (2.97)$$



Es genügt also, die Operatoren  $\mathcal{U}_{n,0}(\Delta t)$  einmal zu berechnen und sie dann  $N$  Mal wiederzuverwenden.

Nach Gleichung (2.91) ist

$$\mathcal{U}_{n,n'}(\Delta t) = \frac{1}{T} \int_0^T dt' e^{-in\omega t'} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}(x, t') \Delta t\right\} e^{in'\omega t'}. \quad (2.98)$$

Mittels einer geeigneten Wahl von  $N$  ist es möglich, das Zeitintervall  $\Delta t$  so kurz zu halten, daß eine Reihenentwicklung der Exponentialfunktion von  $\mathcal{H}(x, t')$  nach wenigen Gliedern abgebrochen werden kann,

$$\left[\exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} \Delta t\right\}\right]_{n,n'} \simeq \sum_{l=0}^{L_{\max}} \frac{(-i)^l}{l!} \left(\frac{\Delta t}{\hbar}\right)^l [\mathcal{H}^l]_{n,n'}, \quad (2.99)$$

wobei  $[\mathcal{H}^l]_{n,n'} := (n|\mathcal{H}^l|n')$ .

Aufgrund der zeitlichen Periodizität kann der Hamiltonoperator  $H(x; t)$  in eine Fourierreihe entwickelt werden,

$$H(x; t) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} H^{(m)}(x) e^{im\omega t}. \quad (2.100)$$

Damit erhält man für den Hamiltonoperator  $\mathcal{H}(x, t')$  des erweiterten Hilbert-raums (siehe Gleichung (2.83))

$$\begin{aligned} [\mathcal{H}]_{n,n'} &= \frac{1}{T} \int_0^T dt' e^{-in\omega t'} \left( \sum_{m=-\infty}^{\infty} H^{(m)} e^{im\omega t'} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t'} \right) e^{in'\omega t'} \\ &= H^{(n-n')} + n'\hbar\omega \delta_{nn'}. \end{aligned} \quad (2.101)$$

Für die Berechnung der Potenzen  $[\mathcal{H}^l]_{n,n'}$  ergibt sich mit der letzten Relation folgende Rekursionsformel,

$$\begin{aligned} [\mathcal{H} \cdot \mathcal{H}^{l-1}]_{n,n'} &= [H \cdot \mathcal{H}^{l-1}]_{n,n'} + n\hbar\omega [\mathcal{H}^{l-1}]_{n,n'} \\ [\mathcal{H}^l]_{n,n'} &= \sum_{\tilde{n}=-\infty}^{\infty} H^{(n-\tilde{n})} \cdot [\mathcal{H}^{l-1}]_{\tilde{n},n'} + n\hbar\omega [\mathcal{H}^{l-1}]_{n,n'}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Aufgrund von Gleichung (2.95) wird zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators  $U(T, 0)$  nur die Spalte  $n' = 0$  der Matrix der  $[\mathcal{H}^l]_{n,n'}$  benötigt.

Die Rekursionsformel (2.102) zeigt, daß zur sukzessiven Berechnung der Potenzen von  $\mathcal{H}$  immer nur die Spalte  $n' = 0$  der jeweiligen Matrizen bekannt sein muß. Folglich ist es zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators  $U(T, 0)$  im ursprünglichen Hilbertraum  $\mathcal{R}$  nicht notwendig, die zeitabhängige Schrödingergleichung (2.84) im erweiterten Hilbertraum  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  vollständig zu lösen. Die Tatsache, daß in der Rekursionsformel (2.102) nur eine Spalte der Matrizen  $[\mathcal{H}^l]_{n,n'}$  benötigt wird, führt auch zu einer erheblichen Einsparung des benötigten Speicherplatzes und der Rechenzeit bei einer numerischen Implementierung der  $(t, t')$ -Methode.

Für den Fall, daß in der Fourierzerlegung (2.100) des ursprünglichen Hamiltonoperators  $H(x; t)$  nur endlich viele Summanden  $H^{(m)}$  verschieden von Null sind, sind auch nur endlich viele Elemente der zur Berechnung des Zeitpropagators  $U(T, 0)$  benötigten Spalten  $[\mathcal{H}^{l \leq L_{\max}}]_{n,0}$  des Hamiltonoperators  $\mathcal{H}$  im erweiterten Hilbertraum verschieden von Null. Dieser Fall tritt z. B. für Potentiale des Typs  $V(x) \cdot \cos(\omega t)$  ein und ist daher von großer praktischer Bedeutung.

Es gelte

$$H^{(m)} = 0 \quad \text{für } |m| > M_{\max}. \quad (2.103)$$

Dann gilt aufgrund von Gleichung (2.101)  $[\mathcal{H}]_{n,0} = 0$  für  $|n| > M_{\max}$ . Für  $[\mathcal{H}^2]_{n,0}$  muß die  $\tilde{n}$ -Summation in der Rekursionsformel (2.102) nur über  $|\tilde{n}| \leq M_{\max}$  erstreckt werden. Aufgrund dessen ist  $-2M_{\max} \leq n \leq 2M_{\max}$ . Für  $[\mathcal{H}^l]_{n,0}$  gilt

$$[\mathcal{H}^l]_{n,0} = 0 \quad \text{für } |n| > lM_{\max},$$

wie der Induktionsschritt auf  $\mathcal{H}^{l+1}$  zeigt: Wiederum in Gleichung (2.102) läuft  $\tilde{n}$  von  $-lM_{\max}$  bis  $lM_{\max}$ . Damit läuft  $n$  von  $-(l+1)M_{\max}$  bis  $(l+1)M_{\max}$ .

Wird also  $N = T/\Delta t$  in Gleichung (2.96) so gewählt, daß die endliche Summe in Gleichung (2.99) zu einer gewünschten Genauigkeit gilt, so führt eine endliche Summation über  $\tilde{n}$  in der Rekursionsformel (2.102) von  $-L_{\max}M_{\max}$  bis  $L_{\max}M_{\max}$  zu keiner weiteren Ungenauigkeit, und es müssen nur die Operatoren  $[\mathcal{H}^l]_{n,0}$  für  $-lM_{\max} \leq n \leq lM_{\max}$  mit  $l = 1, 2, \dots, L_{\max}$  mit Hilfe von (2.102) berechnet werden.

Die gesuchte Rekursionsformel lautet also

$$[\mathcal{H}^l]_{n,0} = \sum_{\tilde{n}=-(l-1)M_{\max}}^{(l-1)M_{\max}} H^{(n-\tilde{n})} \cdot [\mathcal{H}^{l-1}]_{\tilde{n},0} + n\hbar\omega [\mathcal{H}^{l-1}]_{n,0} \quad (2.104)$$

mit  $l = 1, 2, \dots, L_{\max}$ .

Die Berechnung des Zeitpropagators  $U(T, 0)$  über eine Periode erfolgt ausgehend von der Fourierzerlegung (2.100) des Hamiltonoperators  $H(x; t)$  und unter der Annahme (2.103)<sup>7</sup>. Es werden die Zerlegung (2.96) der Zeitpropagation und die Relation (2.97) zwischen den Zeitpropagatoren in  $\mathcal{R}$  und  $\mathcal{R} \otimes \mathcal{T}$  benutzt. Bei der Berechnung der Exponentialfunktion von  $\mathcal{H}$  werden die Entwicklung (2.99) und die Rekursion (2.104) verwendet.

Die obigen Betrachtungen zeigen, daß die  $(t, t')$ -Methode für zeitperiodische Systeme, deren Hamiltonoperator  $H(x; t)$  in der Fourierentwicklung (2.100) nur wenige Terme besitzt, besonders effizient ist. Somit stellt die  $(t, t')$ -Methode eine besonders geeignete Vorgehensweise zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators eines Systems mit “sanfter und kontinuierlicher” Zeitabhängigkeit dar. Für viele praktische Anwendungen tritt genau dieser Fall ein, da diese Systeme häufig eine harmonische Zeitabhängigkeit besitzen.

Die Tatsache, daß die  $(t, t')$ -Methode die einfache Struktur der Fourierentwicklung “sanft und kontinuierlich” getriebener Systeme voll ausnutzt, stellt für die hier betrachteten Systeme den Hauptvorteil dieser Methode dar. Im Vergleich dazu ist das Split-Operator-Verfahren als ein Universalinstrument zu bezeichnen, mit dem Systeme mit beliebiger Zeitabhängigkeit behandelt werden können [94], wobei natürlich ein explizites Ausnutzen der besonderen Eigenschaften der hier betrachteten zeitperiodischen Systeme nicht möglich ist.

Es sei darauf hingewiesen, daß die Effizienz der  $(t, t')$ -Methode nicht von der Stärke der Fourierkomponenten  $H^{(m)}$ ,  $0 \neq |m| \leq M_{\max}$  abhängt, sie also *keine Störungsentwicklung* in den Amplituden der zeitabhängigen Anteile des Hamiltonoperators  $H(x; t)$  darstellt. Ferner ist die  $(t, t')$ -Methode prinzipiell für zeitperiodische Systeme *beliebiger Frequenzen*  $0 < \omega < \infty$  geeignet.

### 2.2.5 Kramers-Henneberger-Transformation

Im Rahmen der klassischen Behandlung zeitlich periodischer Streusysteme wurden schon in den Abschnitten 2.1.3 und 2.1.4 (Seite 20 ff.) wechselstromgetriebene Systeme vorgestellt. Werden die Kräfte, die ein räumlich homogenes elektrisches Wechselfeld auf ein geladenes Teilchen ausübt, aus einem skalaren Potential abgeleitet (siehe z. B. Gleichung (2.10) auf Seite 20), so verschwindet das Potential für  $|x| \rightarrow \infty$  nicht, und die Me-

---

<sup>7</sup>Auch wenn (2.103) nur näherungsweise gilt, ist die Benutzung der  $(t, t')$ -Methode weiterhin sinnvoll.

thoden der Streutheorie können nicht direkt angewendet werden. Mit Hilfe der *Kramers-Henneberger-Transformation* kann diese Schwierigkeit umgangen werden [77, 107, 122]. Die Kramers-Henneberger-Transformation findet ihre Anwendung in der Umsetzung der Wellenpaketpropagationsmethode für Potentiale mit wechselstromartigem Antrieb. Die wichtigsten Aspekte der Kramers-Henneberger-Transformation, deren klassisches Analogon schon in Abschnitt 2.1.4 (Seite 21 ff.) behandelt wurde, sollen an dieser Stelle kurz vorgestellt werden.

Im *Wechselstrombild* (vgl. Abschnitt 2.1.4, Gleichung (2.18) auf Seite 24) lautet die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) + \left( V(x, t) - x f(t) \right) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t), \quad (2.105)$$

wobei das Potential  $V(x, t)$  die Definition asymptotisch freier Zustände zulässt und das Potential des elektrischen Feldes im Term  $x f(t)$  enthalten ist.<sup>8</sup>

Gleichung (2.105) soll zunächst in das lateral oszillierende Koordinatensystem (vgl. Gleichung (2.13), Seite 23)

$$\xi := x - q(t) \quad \text{mit} \quad q(t) := \frac{1}{m} \int^t dt' p(t'), \quad p(t) := \int^t dt' f(t')$$

transformiert werden. Die entsprechende Transformation lautet

$$\psi(x, t) = \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} x p(t) - \frac{i}{2m\hbar} \int^t dt' (p(t'))^2 \right\} \phi(\xi, t), \quad (2.106)$$

wie in Anhang C gezeigt wird. Die obige Transformation führt auf die folgende, zu Gleichung (2.105) äquivalente Schrödingergleichung mit einem *lateral oszillierendem Potential*,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}(\xi, t) + V([\xi + q(t)], t) \phi(\xi, t) = i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t}(\xi, t). \quad (2.107)$$

Die dritte, äquivalente Darstellung mittels eines *zeitperiodischen Vektorpotentials* erhält man mit Hilfe der Transformation

$$\Phi(x, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{2m\hbar} \int^t dt' (p(t'))^2 \right\} \phi(\xi, t), \quad (2.108)$$

---

<sup>8</sup>Es wird in dieser Arbeit nur der Fall periodischer Funktionen  $f(t+T) = f(t)$  betrachtet, die Relationen (2.105)-(2.110) gelten jedoch für beliebige  $f(t)$ .

wie ebenfalls in Anhang C gezeigt wird. Diese Transformation führt auf die Schrödingergleichung

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + p(t) \right)^2 \Phi(x, t) + V(x, t) \Phi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t}(x, t). \quad (2.109)$$

Die die Gleichungen (2.105) und (2.109) direkt verbindende Transformation ist schließlich durch

$$\Phi(x, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} x p(t) \right\} \psi(x, t) \quad (2.110)$$

gegeben (siehe Anhang C).

Die Eigenzustände des Operators

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + p(t) \right)^2$$

sind analytisch bekannt. Sie beschreiben ein geladenes Teilchen, das sich in einem räumlich homogenen, elektrischen Wechselfeld (bzw. in einem monochromatischen Laserfeld) bewegt und haben die Form einer ebenen Welle mit einer zusätzlichen, oszillierenden Phase, wie die letzte Gleichung zeigt. Diese Zustände werden als *Volkovzustände* bezeichnet [123] und finden in der Atomphysik z. B. in der Berechnung von Ionisationswahrscheinlichkeiten eine breite Anwendung.

Die physikalische Interpretation der drei äquivalenten Schrödingergleichungen (2.105), (2.107) und (2.109) ist dieselbe wie in der klassischen Beschreibung und wurde in Abschnitt 2.1.4, Seite 21 ff., schon ausführlich besprochen. Ein Vergleich mit dem klassischen Analogon der Kramers-Henneberger-Transformation im Hamiltonformalismus (siehe Abschnitt 2.1.4, Seite 24) zeigt, daß die drei äquivalenten Darstellungen (2.105), (2.107) und (2.109) nichts weiter als die in üblicher Weise quantisierten Hamiltonfunktionen der klassischen Mechanik darstellen, was natürlich auch zu erwarten war.

In der Darstellung mit Hilfe eines zeitperiodischen Vektorpotentials wurde im Vergleich zur klassischen Mechanik der Term  $-(p(t))^2/(2m)$  nicht berücksichtigt. Dieser Term, jedoch mit positivem Vorzeichen, beschreibt die Energie der "Quiverbewegung", die das Teilchen außerhalb des Einflußbereichs des Potentials  $V(x, t)$  aufgrund des elektrischen Feldes ausführt. Als Quiverbewegung wird dabei die oszillatorische Bewegung eines geladenen Teilchens in

einem räumlich homogenen elektrischen Wechselfeld bezeichnet. Auf Seiten der klassischen Mechanik führt eine Addition von  $(p(t))^2/(2m)$  zur Hamiltonfunktion  $H_{\text{VP}}(x, p_{\text{kan}}, t)$  (siehe Gleichung (2.20), Seite 25) zu denselben Bewegungsgleichungen.

Hervorzuheben ist, daß die drei Transformationen (2.106), (2.108) und (2.110) allesamt umkehrbar sind. Schließlich sei noch angemerkt, daß die Kramers-Henneberger-Transformation auch auf den Fall eines “elektrischen” Potentials (im Wechselstrombild), das sich nur asymptotisch für  $|x| \rightarrow \infty$  wie  $xf(t)$  verhält, verallgemeinert werden kann [107].

### 2.2.6 Numerische Behandlung eindimensionaler zeitperiodischer Streusysteme

Bei der Untersuchung der Anwendungsbeispiele werden in den folgenden Kapiteln die in Abschnitt 2.2.3, Seite 46 ff., definierten totalen und partiellen Transmissionen und Reflexionen sowie die effektive Aufenthaltszeit berechnet. Zu diesem Zweck wird die zeitliche Evolution von Wellenpaketen betrachtet, so wie sie in Abbildung 2.5 skizziert ist. Die hier beschriebene Methode wird im Verlauf der Arbeit als *Wellenpaketpropagationsmethode* bezeichnet. Das zeitperiodische Potential  $V(x, t)$  ist so gewählt, daß es die Definition asymptotisch freier Zustände zuläßt. Zur Berechnung der oben angeführten, die Streuung am Potential  $V(x, t)$  charakterisierenden Größen wird das Potential, dessen Einfluß auf das gestreute Teilchen außerhalb des Wechselwirkungsbereichs  $[-\Lambda, \Lambda]$  vernachlässigbar klein ist, in einen großen Kasten  $-R \leq x \leq R$  eingesperrt, auf dessen Rändern periodische Randbedingungen gelten.

Aufgrund der periodischen Randbedingungen ergibt sich eine diskrete Basis, mit deren Hilfe die Zeitentwicklung der Wellenpakete numerisch berechnet werden kann. In dieser Basis wird der Zeitentwicklungsoperator über eine Periode mit Hilfe der  $(t, t')$ -Methode, siehe Abschnitt 2.2.4, Seite 51 ff., berechnet, wodurch sich die zeitliche Evolution stroboskopisch verfolgen läßt (vgl. Gleichung (2.47) auf Seite 36). Als Basis werden *ebene Wellen*,

$$g_j(x) := \frac{1}{\sqrt{2R}} \exp\left\{i \frac{\pi}{R} j x\right\} \quad , \quad j \in \mathbb{Z}, \quad (2.111)$$

bzw. gegebenenfalls gerade und ungerade Kombinationen davon verwendet.

Bei der Wellenpaketpropagation ist zu beachten, daß das anfängliche einlaufende Wellenpaket nur vernachlässigbar wenig mit dem Wechselwirkungs-

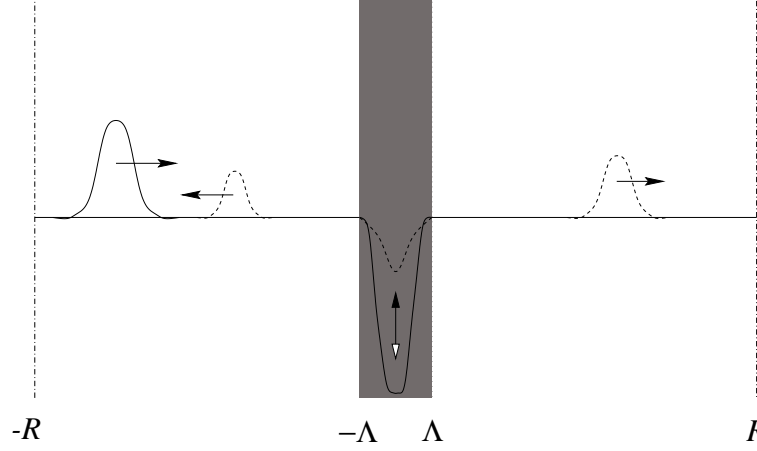


Abbildung 2.5: Eindimensionales zeitperiodisches Potential im durch seine Reichweite definierten Wechselwirkungsbereich  $[-\Lambda, \Lambda]$  (grau unterlegt), das in einen Kasten  $-R \leq x \leq R$  eingesperrt ist, auf dessen Rändern bei  $\pm R$  (strichpunktierte Linien) periodische Randbedingungen gelten. Ein einlaufendes Wellenpaket (durchgezogene Linie) sowie je ein transmittiertes und reflektiertes Paket (gestrichelte Linien) sind ebenfalls skizziert.

bereich überlappt. Die Streuung ist dann abgeschlossen, wenn der gesamte Überlapp mit dem Wechselwirkungsbereich aller auslaufenden Wellenpakete wieder vernachlässigbar klein geworden ist. Dabei ist darauf zu achten, daß nicht zu lange in der Zeit propagiert wird, da aufgrund der periodischen Randbedingungen ein bei  $x = R$  auslaufendes Paket bei  $x = -R$  wieder “von links auf das Potential zuläuft”. Die maximal mögliche Propagationszeit ist von der Energie des einlaufenden Pakets abhängig. Die S-Matrix kann in dieser Darstellung mit periodischen Randbedingungen nicht direkt über die Definition der Mølleroperatoren (siehe Gleichungen (2.53), Seite 39, und (2.27), Seite 32) berechnet werden, da dabei alle in der verwendeten Basis berücksichtigten Energien in derselben Weise behandelt würden. Insbesondere würden sehr kleine Energien “genauso lange in der Zeit propagiert” wie größere Energien, wobei allerdings Wellenpakete, die aus großen Energien aufgebaut sind, in dieser Zeit eine deutlich größere Strecke zurücklegen würden und aufgrund der periodischen Randbedingungen mehrmals den Wechselwirkungsbereich passieren würden.

Unter anderem aufgrund der obigen Betrachtungen muß

$$R \gg \Lambda \quad (2.112)$$

gewählt werden. Ein weiterer Grund, der zur Einhaltung dieser Bedingung zwingt, ist die schon in Abschnitt 2.2.3 bei der Definition der partiellen und totalen Transmissionen und Reflexionen angesprochene Tatsache, daß die Impulsunschärfe des einlaufenden Pakets möglichst klein sein sollte. Auf diese Weise lassen sich die mit Hilfe der Wellenpaketpropagationsmethode berechneten Werte der Transmission bzw. Reflexion näherungsweise als die der Definition entsprechenden Werte zu einer scharfen einlaufenden Energie interpretieren und sind nicht als eine Faltung über einen Energiebereich nicht vernachlässigbarer Breite anzusehen. Desweiteren hat eine kleine Impulsunschärfe eine große Ortsunschärfe zur Folge. Diese ist notwendig, damit die auf diese Weise berechnete Transmission bzw. Reflexion unabhängig von der Phasenlage des Potentials zu Beginn der Zeitpropagation ist. Somit liegen die Grenzen der hier verwendeten Methode darin, daß die so berechnete Transmission bzw. Reflexion immer eine Faltung über einen kleinen Energiebereich darstellt und daß die Berechnung sowohl der Transmission bzw. Reflexion als auch der effektiven Aufenthaltszeit für sehr kleine Energien des einlaufenden Wellenpakets nicht möglich ist. Die letzte Einschränkung rührt daher, daß bei der Streuung an einem zeitperiodischen Potential eine endliche Wahrscheinlichkeit dafür besteht, daß es auslaufende Wellenpakete mit den Energien  $E + n\hbar\omega$  gibt, die sich viel schneller als das einlaufende Paket der sehr kleinen Energie  $E$  bewegen und daher schon zum zweiten Mal – aufgrund der periodischen Randbedingungen – in das Potential einlaufen können, während ein Teil des ursprünglichen Pakets das Potential noch gar nicht verlassen hat.

Die Vorteile der hier verwendeten Methode liegen darin, daß prinzipiell an das Potential  $V(x, t)$  keine weitere Forderung gestellt werden muß, als daß es die Definition asymptotisch freier Zustände zulassen muß. Die Verwendung der  $(t, t')$ -Methode garantiert, daß im Prinzip keinerlei Einschränkung weder bezüglich Frequenz noch bezüglich der Amplitude des zeitperiodischen Anteils von  $V(x, t)$  existiert, da die  $(t, t')$ -Methode die periodische Zeitabhängigkeit von  $V(x, t)$  in vollem Umfang berücksichtigt. In Abschnitt 2.2.4, Seite 51 ff., wurde gezeigt, daß sich die  $(t, t')$ -Methode am effizientesten für harmonisch getriebene Systeme umsetzen läßt. Für viele Anwendungen sind jedoch gerade harmonisch getriebene Systeme viel realistischere Beschreibungen als etwa periodisch gekickte Systeme, deren analytische Behandlung andererseits deutlich einfacher ist [56, 81, 82].

In den folgenden Kapiteln werden zwei verschiedene Klassen von eindimensionalen zeitlich periodischen Streupotentialen behandelt, die im Rah-



men der klassischen Beschreibung der Streuung an Potentialen dieser Art schon in den Abschnitten 2.1.2 und 2.1.3 vorgestellt wurden. Es handelt sich einerseits um Systeme, deren zeitperiodischer Antrieb in einem räumlich begrenzten Gebiet stattfindet und andererseits um Systeme mit wechselstromartigem Antrieb, die mit Hilfe der Kramers-Henneberger-Transformation in lateral oszillierende Potentiale transformiert werden können.

### Systeme mit lokal begrenztem Antrieb

Die betrachteten Potentiale sind von der Form

$$V(x, t) = V_0(x) + V_1(x) \cdot \cos(\omega t),$$

wobei sowohl  $V_0(x)$  als auch  $V_1(x)$  die Definition asymptotisch freier Zustände zulassen. Aufgrund von  $\cos(\omega t) = (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t})/2$  sind für diesen Potentialtyp nur die drei Fouriermoden  $H^{(0, \pm 1)}$  des Hamiltonoperators in seiner Zerlegung

$$H(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} H^{(m)}(x) e^{im\omega t}$$

verschieden von Null, wodurch die Verwendung der  $(t, t')$ -Methode bei der Berechnung des Zeitentwicklungsoperators sehr effizient ist (siehe Abschnitt 2.2.4, Seite 56).

### Systeme mit wechselstromartigem Antrieb

In diesem Fall liefert die Kramers-Henneberger-Transformation drei äquivalente Darstellungen: das Wechselstrombild (siehe Gleichung (2.105), Seite 58), das Bild des lateral oszillierenden Potentials (siehe Gleichung (2.107), Seite 58) und das Bild eines zeitperiodischen Vektorpotentials (siehe Gleichung (2.109), Seite 59). Einzig die Darstellung mittels eines lateral oszillierenden Potentials der Form

$$V(x, t) = V([x - \lambda \cos(\omega t)])$$

läßt die Definition asymptotisch freier Zustände zu. Da das Potential in dieser Form nicht mehr als Produkt einer Funktion des Ortes  $x$  und einer Funktion der Zeit  $t$  geschrieben werden kann, ist die Anzahl der nichtverschwindenden Floquetmoden  $H^{(m)}$  im allgemeinen groß. Für ein lateral oszillierendes

Rechteckpotential sind z. B. alle  $H^{(m)}$  verschieden von Null, und ihre Stärke fällt für große  $m$  nur mit  $1/m$  ab (siehe [74] und Anhang D), was die Effizienz der  $(t, t')$ -Methode stark beeinträchtigt.

In der Darstellung mit Hilfe eines zeitperiodischen Vektorpotentials jedoch ist nur der Term der kinetischen Energie (vgl. (2.109))

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + p(t) \right)^2$$

zeitabhängig. Mit  $p(t) \propto \sin(\omega t)$  (siehe Abschnitt 2.2.5, Seite 57) folgt, daß in dieser Darstellung nur die Floquetmoden  $H^{(0, \pm 1, \pm 2)}$  in der Zerlegung des Hamiltonoperators verschieden von Null sind. Somit bietet diese Darstellung eine gute Grundlage zur Anwendung der  $(t, t')$ -Methode.

Insgesamt also wird die zeitliche Evolution der Wellenpakete im Ortsraum in der Darstellung mit Hilfe eines lateral oszillierenden Potentials verfolgt, um hier den Überlapp mit dem Wechselwirkungsbereich zu berechnen, während die eigentliche Berechnung der zeitlichen Propagation in der Darstellung mittels eines zeitperiodischen Vektorpotentials stattfindet. Die Verbindung zwischen beiden Darstellungen ist durch die Kramers-Henneberger-Transformation gegeben. Das Wechselstrombild kann bei der in dieser Arbeit verwendeten Methode nicht benutzt werden, da das Potential des elektrischen Feldes  $xf(t)$  nicht die periodischen Randbedingungen bei  $x = \pm R$  erfüllt.

# Kapitel 3

## Streusysteme mit lokal begrenztem Antrieb

In diesem Kapitel wird die Streuung an zeitperiodischen Potentialen, bei denen der zeitabhängige Antrieb in einem räumlich begrenzten Gebiet stattfindet, untersucht. Bei der Beschreibung dieser Systeme ist eine direkte Anwendung der Konzepte der konventionellen Streutheorie möglich. Es werden exemplarisch zwei Beispielsysteme untersucht, wobei wir uns auf anziehende Potentiale, die aus einer Mulde bestehen, deren “Boden” vertikal oszilliert, beschränken. Eine vertikale Oszillation des Bodens einer Potentialmulde kann in mesoskopischen Systemen wie z. B. einem Quantendot mit Hilfe von zeitperiodischen Gatespannungen realisiert werden. Mit Hilfe der Gatespannung können die diskreten Energieniveaus des Quantendots bezüglich der Fermienergie verschoben werden (siehe z. B. [30]).

Die hier betrachteten Systeme besitzen einerseits eine einfach anmutende Potentialform, so daß eine detaillierte Beschreibung der Dynamik möglich ist. Andererseits kann die Streuung an diesen Potentialen chaotisch sein, so daß diese Systeme komplexes Verhalten zeigen können, so wie es schon in Abschnitt 2.1, Seite 12 ff., erläutert wurde. Im folgenden wird die Streuung an einem *Rechtecktopf mit oszillierendem Boden* und an einem ebenfalls vertikal oszillierenden,  $1/\cosh^2(x)$ -förmigen *Potential* sowohl klassisch als auch quantenmechanisch untersucht.

### 3.1 Rechtecktopf mit oszillierendem Boden

Das hier betrachtete Potential hat die Form eines Rechtecks, dessen Boden vertikal harmonisch oszilliert,

$$V(x, t) = [V_0 + V_1 \cos(\omega t)] \theta(L - |x|). \quad (3.1)$$

Die Hamiltonfunktion dieses Systems ist durch Gleichung (2.1), Seite 12, gegeben. Der Rechtecktopf mit oszillierendem Boden ist in Abbildung 3.1 skizziert. Die statische, und damit auch die mittlere Tiefe des Potentials  $V(x, t)$  ist durch  $V_0$  gegeben und die Amplitude der Oszillation des Topfbodens beträgt  $V_1$ . Die Gesamtbreite des Potentialtopfs beläuft sich auf  $2L$ .

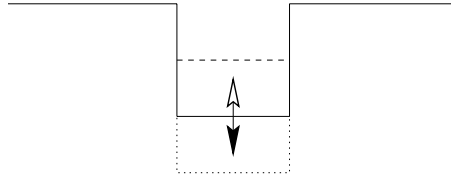


Abbildung 3.1: Rechtecktopf mit oszillierendem Boden

#### 3.1.1 Klassische Beschreibung der Streuung am Rechtecktopf mit oszillierendem Boden

Ein Vergleich von Gleichung (3.1) mit (2.4), Seite 19, zeigt, daß es genügt, das durch das Streupotential

$$\tilde{V}(\tilde{x}, \tau) := [\tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau)] \theta(1 - |\tilde{x}|) \quad (3.2)$$

definierte System in dimensionslosen Einheiten zu betrachten (man beachte  $\theta(L - |x|) = \theta(1 - |x/L|)$ ) und die Bewegungsgleichungen sowie die zugehörige Hamiltonfunktion in dimensionslosen Größen, Gleichungen (2.6)-(2.8), Seite 19). Die beiden freien Parameter des Rechtecktopfes mit oszillierendem Boden sind in dieser Darstellung durch  $\tilde{V}_0$  und  $\tilde{V}_1$  gegeben.

Die Streuung eines punktförmigen Teilchens am durch Gleichung (3.2) definierten Potential ist vollständig durch eine diskrete Abbildung gegeben. Der Gradient des Potentials  $\tilde{V}(\tilde{x}, \tau)$ , und damit auch die auf das Teilchen wirkende Kraft, verschwindet für alle  $\tilde{x}$  außer an den Sprungstellen des Potentials bei  $\tilde{x} = \pm 1$ . An diesen Sprungstellen erfährt das Teilchen einen unendlich

kurzen Kraftstoß, so daß die momentane Gesamtenergie des Teilchens erhalten bleibt. Ist die kinetische Energie des Teilchens kurz vor dem Auftreffen auf eine der beiden Unstetigkeiten des Potentials größer als die momentane Höhe des Potentialsprungs im Moment des Kraftstoßes, ändert sich die Bewegungsrichtung des Teilchens nicht und der Impuls kurz nach dem Passieren der Unstetigkeit des Potentials ergibt sich aus der Erhaltung der momentanen Gesamtenergie. Ist hingegen die kinetische Energie des Teilchens kurz vor dem Auftreffen auf eine der beiden Unstetigkeiten des Potentials kleiner als die momentane Höhe des Potentialsprungs, so wird das Teilchen am Potentialsprung reflektiert und läuft in entgegengesetzter Richtung mit gleicher Geschwindigkeit zurück. Aufgrund des vertikal oszillierendem Bodens des Rechteckpotentials ist die *Gesamtenergie des Teilchens zeitabhängig*.

Die Anfangsbedingungen in den hier verwendeten dimensionslosen Größen lauten

$$\tilde{x}_0 \cdot \tilde{p}_0 < 0 \quad , \quad |\tilde{x}_0| = 1 \quad , \quad \tau_0 \in [0, 2\pi).$$

Dabei trifft das mit dem Impuls  $\tilde{p}_0$  einlaufende Teilchen an der Stelle  $\tilde{x}_0$  zum Zeitpunkt  $\tau_0$  zum ersten Mal auf eine der beiden Unstetigkeiten des Potentials. Kurz nach dem ersten Kraftstoß zum Zeitpunkt  $\tau_0$  ist der Impuls des Teilchens durch  $\tilde{p}_1$  gegeben (siehe Gleichungen (3.3)-(3.5)). Für den Fall  $\tilde{p}_0^2/2 > \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0)$  trifft das Teilchen bei  $\tilde{x}_1$  zum Zeitpunkt  $\tau_1$  auf die zweite Unstetigkeit des Potentials. Für den Fall  $\tilde{p}_0^2/2 < \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0)$  kann das Teilchen nicht in den Wechselwirkungsbereich  $-1 < \tilde{x} < 1$  eindringen und läuft mit dem Impuls  $\tilde{p}_1 = -\tilde{p}_0$  aus. In diesem Fall ist der Zeitpunkt  $\tau_1$  des Auftreffens auf die zweite Unstetigkeit des Potentials nicht definiert und der freie, auslaufende Zustand sei in der  $\tilde{x}$ - $\tilde{p}$ -Ebene des Phasenraums durch  $(\tilde{x} = \tilde{x}_1 = \tilde{x}_0 + 2\pi\tilde{p}_1, \tilde{p} = \tilde{p}_1)$  definiert, wobei  $2\pi$  die Periode des oszillierenden Rechteckpotentials ist.<sup>1</sup> Ist der Zeitpunkt  $\tau_1$  definiert, so wird die Dynamik des Teilchens von den Gleichungen (3.6)-(3.8) bestimmt. Dabei bezeichnet  $\tilde{p}_n$  den Impuls kurz nach dem  $n$ -ten Kraftstoß,  $\tilde{x}_n$  den Ort des  $(n+1)$ -ten Kraftstoßes und  $\tau_n$  den Zeitpunkt des  $(n+1)$ -ten Kraftstoßes, den das Teilchen erfährt. Ist  $\tau_{n=N}$  nicht definiert, so läuft das Teilchen nach dem  $N$ -ten Kraftstoß aus dem Bereich  $-1 < \tilde{x} < 1$  heraus und bewegt sich mit dem Impuls  $\tilde{p}_N$  frei. Dieser auslaufende Zustand sei in der  $\tilde{x}$ - $\tilde{p}$ -Ebene des Phasenraums als  $(\tilde{x} = \tilde{x}_N = \tilde{x}_{N-1} + 2\pi\tilde{p}_N, \tilde{p} = \tilde{p}_N)$  definiert. Für im Topf gefangene Teilchen gilt  $|\tilde{p}_n| = |\tilde{p}_1|$  für  $0 < n < N$ , da diese an den Topfwänden (mit

---

<sup>1</sup>Der dreidimensionale Phasenraum  $(\tilde{x}, \tilde{p}, \tau)$  wurde in Abschnitt 2.1 eingeführt, siehe Gleichungen (2.2) auf Seite 13.

zeitabhängigen Höhen) elastisch – im Sinne der Erhaltung der momentanen Gesamtenergie – reflektiert werden. Die maximale Energieänderung, die ein Teilchen, das am Potential (3.2) gestreut wird, erfahren kann, ist durch maximale Änderung der potentiellen Energie des Teilchens gegeben. Diese ist durch das Doppelte der Amplitude der Oszillation des Topfbodens gegeben, sie beträgt also  $2\tilde{V}_1$ .

Quantitativ wird die Streuung eines punktförmigen Teilchens am Potential (3.1) somit durch die folgenden diskreten Gleichungen beschrieben,

$$\tilde{p}_1 = \begin{cases} -\tilde{p}_0 & \frac{\tilde{p}_0^2}{2} < \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0) \\ \tilde{f}(\tilde{p}_0, \tau_0) & \frac{\tilde{p}_0^2}{2} > \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0) \end{cases} \quad (3.3)$$

$$\tilde{x}_1 = \begin{cases} \tilde{g}(\tilde{x}_0, \tilde{p}_0) & \frac{\tilde{p}_0^2}{2} < \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0) \\ -\tilde{x}_0 & \frac{\tilde{p}_0^2}{2} > \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0) \end{cases} \quad (3.4)$$

$$\tau_1 = \begin{cases} \text{nicht def.} & \frac{\tilde{p}_0^2}{2} < \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0) \\ \tau_0 + \frac{2}{|\tilde{p}_1|} & \frac{\tilde{p}_0^2}{2} > \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_0) \end{cases} \quad (3.5)$$

$$\tilde{p}_n = \begin{cases} (-1)^n \tilde{p}_1 & \frac{\tilde{p}_{n-1}^2}{2} + \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_{n-1}) < 0 \\ \tilde{f}(\tilde{p}_{n-1}, \tau_{n-1}) & \frac{\tilde{p}_{n-1}^2}{2} + \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_{n-1}) > 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

$$\tilde{x}_n = \begin{cases} (-1)^n \tilde{x}_0 & \frac{\tilde{p}_{n-1}^2}{2} + \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_{n-1}) < 0 \\ \tilde{g}(\tilde{x}_{n-1}, \tilde{p}_{n-1}) & \frac{\tilde{p}_{n-1}^2}{2} + \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_{n-1}) > 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\tau_n = \begin{cases} \tau_{n-1} + \frac{2}{|\tilde{p}_n|} & \frac{\tilde{p}_{n-1}^2}{2} + \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_{n-1}) < 0 \\ \text{nicht def.} & \frac{\tilde{p}_{n-1}^2}{2} + \tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau_{n-1}) > 0 \end{cases} \quad (3.8)$$

$$\tilde{f}(\tilde{p}, \tau) = \frac{\tilde{p}}{|\tilde{p}|} \sqrt{\tilde{p}^2 - 2(\tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos(\tau))}$$

$$\tilde{g}(\tilde{x}, \tilde{p}) = \frac{\tilde{x}}{|\tilde{x}|} (1 + |\tilde{p}|2\pi).$$

Aus den Bewegungsgleichungen folgt, daß im Falle  $\tilde{V}_0 < 0$  und  $0 < 2\tilde{V}_1 < |\tilde{V}_0|$  alle Bahnen, die innerhalb des Topfes starten und deren Anfangsimpulse  $\tilde{p}$  die Bedingung

$$|\tilde{p}| < \sqrt{2(|\tilde{V}_0| - 2\tilde{V}_1)} \quad (3.9)$$

erfüllen, den Wechselwirkungsbereich nicht verlassen können, da ihre Gesamtenergie niemals positiv werden kann. In diesem Fall ist der Phasenraum

des Systems in zwei Gebiete aufgeteilt: der Bereich gefangener Trajektorien und der Bereich der Streubahnen.

Da sich bei der Reflexion an einer der Topfwände nur das Vorzeichen des Impulses ändert, sind alle im Topf gefangenen Bahnen, die Bedingung (3.9) erfüllen, periodisch, wobei das Verhältnis der Periode  $4/\tilde{p}$  einer solchen Bahn mit Impuls  $\tilde{p}$  zur Periode  $2\pi$  des Potentials in der Regel nicht ganzzahlig ist. Im dreidimensionalen Phasenraum  $(\tilde{x}, \tilde{p}, \tau)$  des zeitperiodischen Systems bewegt sich eine solche periodische Bahn mit dem Impuls  $\tilde{p}$  auf zwei parallelen Zylindern  $(-1 \leq \tilde{x} \leq 1, \pm|\tilde{p}|, 0 \leq \tau < 2\pi)$ , deren Topologie der eines Torus entspricht.<sup>2</sup> Dabei ist zu beachten, daß der Impuls des bei  $\tilde{x} = 1$  reflektierten Teilchens von  $+\tilde{p}$  auf  $-\tilde{p}$  springt und das Teilchen in entgegengesetzter Richtung zum Ort des nächsten Kraftstoßes bei  $\tilde{x} = -1$  läuft. Desweiteren sind die betrachteten periodischen Bahnen *marginal stabil*, da sich zwei Bahnen, deren Impulse sich nur wenig voneinander unterscheiden, linear in der Zeit voneinander entfernen. Somit kann es in diesem Gebiet des Phasenraums *keine* chaotischen Bereiche geben.

Diese Tatsache kann auch folgendermaßen begründet werden: Die Dynamik der im Topf gefangenen Bahnen, für die Bedingung (3.9) erfüllt ist, entspricht der Dynamik in einem Topf mit unendlich hohen Wänden und gleicher Breite, dessen Boden mit derselben Amplitude  $\tilde{V}_1$  vertikal oszilliert. Da die vertikale Oszillation des Topfbodens *keine* zusätzlichen Kräfte auf das Teilchen ausübt, entspricht die Dynamik im Phasenraum eines in einem unendlich hohen Topf mit oszillierendem Boden gefangenen Teilchens der eines in einem unendlich hohen Topf, dessen Boden nicht oszilliert, gefangenen Teilchens. Somit entspricht die Phasenraumstruktur der im Rechtecktopf mit oszillierendem Boden gefangenen Bahnen, für die (3.9) gilt, der Phasenraumstruktur, die sich für einen unendlichen hohen Rechtecktopf gleicher Breite, dessen Boden nicht oszilliert, für diesen Impulsbereich ergibt. Die Bewegung in einem statischen Rechteckpotential ist *regulär*, da dieses System eindimensional und zeitunabhängig und daher integrierbar ist.

Desweiteren können auch Bahnen, die innerhalb des durch Gleichung (3.2) definierten Topfes mit einem Impuls  $\tilde{p}$  starten, der Bedingung (3.9) nicht erfüllt, für alle Zeiten gefangen bleiben. In diesem Fall muß der Impuls so gewählt werden, daß sie die Strecke von einer Topfwand zur anderen in einer Zeit von  $n2\pi$ , also einem ganzzahligen Vielfachen der Periode des Potenti-

---

<sup>2</sup>Aufgrund der zeitlichen Periodizität des Systems ist  $\tau$  eine winkelartige Koordinate und  $\tau = 0$  und  $\tau = 2\pi$  sind miteinander zu identifizieren.

als, zurücklegen. Dazu müssen jedoch der Impuls  $\tilde{p}$  und die Phasenlage des Potentials in den Anfangsbedingungen so gewählt werden, daß die Gesamtenergie des Teilchens beim Auftreffen auf eine der beiden Topfwände stets negativ ist. Für den Impuls ergibt sich auf diese Weise die *Resonanzbedingung*  $\tilde{p}_n = 1/(n\pi)$ .

Wird in den Anfangsbedingungen ein Impuls gewählt, der die gerade beschriebene Resonanzbedingung nicht exakt erfüllt, so wird die Bahn, die zunächst periodisch zwischen den beiden Topfwänden hin- und herläuft, langsam gegenüber der Oszillation des Potentials “aus der Phase laufen” und kann dann sogar den Topf verlassen. In diesem Fall verläuft die Trajektorie des Teilchens im Phasenraum nicht mehr auf einem Torus. Für Anfangsimpulse, die die Bedingung (3.9) nicht erfüllen, bleiben also nur die zu den angesprochenen Resonanzbedingungen gehörenden, geschlossenen Bahnen erhalten. Diese Bahnen liegen im Phasenraum in (im allgemeinen) mehreren Tori.

Diese periodischen Bahnen sind für verschiedene Anfangsimpulse voneinander isoliert und die zu ihnen gehörenden periodischen Bahnen sind marginal stabil, somit kann es auch in diesem Bereich des Phasenraums keine chaotischen Bereiche geben. Bezüglich kleiner Variationen in der anfänglichen Phasenlage des Potentials ergibt sich ein Intervall, das zu Anfangsbedingungen führt, die zu den betrachteten periodischen Bahnen gehören. Somit liegen diese periodischen Bahnen im Phasenraum innerhalb einer Teilmenge des zum jeweiligen Anfangsimpuls gehörenden Torus. Diese Teilmengen sind echte Teilmengen, so daß in keinem dieser Fälle der gesamte Torus von periodischen Bahnen ausgefüllt wird.

Einlaufende Streubahnen können aufgrund dieses *Resonanzmechanismus* in die Nähe der gefangenen, periodischen Orbits kommen und auf diese Weise für sehr lange Zeit im Wechselwirkungsbereich festgehalten werden, wie in Anhang E bei der Untersuchung der Verteilung der Aufenthaltszeiten gezeigt wird.

In der Ablenkfunktion ist das Überschreiten einer Anfangsbedingung einer Streubahn, die asymptotisch auf eine der gerade beschriebenen, gefangenen, periodischen Bahnen zuläuft, als eine Unstetigkeit zu sehen. Aufgrund der oben beschriebenen Resonanzbedingung können diese periodischen Bahnen jedoch keine fraktale Menge bilden, somit sind auch keine selbstähnlichen Strukturen in der Ablenkfunktion zu erwarten. Desweiteren zeigen diese Betrachtungen, daß auch in dem für Streubahnen zugänglichen Teil des Phasenraums keine chaotischen Bereiche vorhanden sind.



Schließlich ist noch festzustellen, daß die sich im Phasenraum ergebenden Strukturen hauptsächlich vom Verhältnis  $|\tilde{V}_1/\tilde{V}_0|$  abhängen. Aus der obigen Diskussion der Phasenraumstruktur ist ersichtlich, daß sich für beliebige  $\tilde{V}_0$  und  $\tilde{V}_1$  die gleichen Strukturen ergeben können: der Bereich gefangener Bahnen (siehe Gleichung (3.9)), der Bereich der angesprochenen Resonanzen und der Bereich der “über das Potential hinweglaufenden Streubahnen”, deren einlaufender Impuls so groß ist, daß die Gesamtenergie des Teilchens stets positiv bleibt. Das Verhältnis der Größen dieser Bereiche im Phasenraum hängt im wesentlichen von  $|\tilde{V}_1/\tilde{V}_0|$  ab.

Um die Ergebnisse dieser Diskussion zu überprüfen und um die Dynamik eines am Rechtecktopf mit oszillierendem Boden gestreuten Teilchens genauer zu untersuchen, werden die Bewegungsgleichungen (3.3)-(3.8) numerisch iteriert. Auf diese Weise wurden stroboskopische Phasenraumbilder, die Eigenschaften der Ablenkfunktion und das Verhalten der Verteilung der Aufenthaltszeiten untersucht (siehe Abschnitt 2.1, Seite 15 ff., für die entsprechenden Definitionen). Dabei wurde bestätigt, daß das Verhalten des betrachteten dynamischen Systems stark vom Verhältnis der Potentialstärken  $\tilde{V}_0$  und  $\tilde{V}_1$  abhängt, während eine Variation des absoluten Wertes von  $\tilde{V}_0$  bei konstant gehaltenem  $|\tilde{V}_1/\tilde{V}_0|$  nur wenige Veränderungen bewirkt. Aus diesem Grund werden im folgenden die Fälle  $\tilde{V}_1 \lesssim |\tilde{V}_0|$  und  $\tilde{V}_1 \ll |\tilde{V}_0|$  genauer untersucht, wobei die absoluten Werte von  $\tilde{V}_0$  und  $\tilde{V}_1$  an den jeweiligen Typ der Untersuchung angepaßt wurden.

Abbildung 3.2 zeigt eine stroboskopische Aufnahme des Phasenraums für den Fall  $\tilde{V}_0 = -10^{-4}$  und  $\tilde{V}_1 = 10^{-5} \ll |\tilde{V}_0|$ . Alle dargestellten Trajektorien laufen von links ein und treffen zum Zeitpunkt  $\tau_0 = 0$  auf den linken Rand des Rechtecktopfs. In zeitlich konstanten Abständen von  $2\pi$ , der Periode der Oszillation des Potentials, werden die Trajektorien im Phasenraum dargestellt. Es sind keine chaotischen Bereiche im Phasenraum erkennbar.

In Abbildung 3.3 ist die Ablenkfunktion für dieselben Parameter dargestellt. Berücksichtigt wurde eine große Anzahl Streubahnen mit einlaufenden Impulsen aus verschiedenen großen Intervallen. Alle dargestellten Trajektorien laufen in derselben Phasenlage der Oszillation des Topfbodens in den Potentialbereich ein. Selbstähnliche Strukturen sind nicht vorhanden.

Abbildung 3.4 zeigt eine stroboskopische Aufnahme des Phasenraums für den Fall  $\tilde{V}_0 = -10^{-4}$  und  $\tilde{V}_1 = 9.99 \cdot 10^{-5}$ . Auch in diesem Fall laufen alle dargestellten Trajektorien von links ein und treffen zum Zeitpunkt  $\tau_0 = 0$  auf den linken Rand des Rechtecktopfs. Es sind wiederum keine chaotischen Bereiche im Phasenraum erkennbar. Der für die gewählte Anfangsphase von

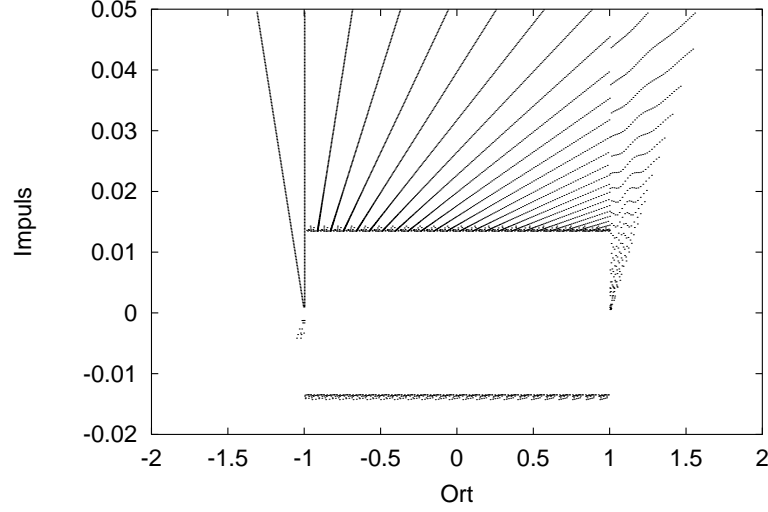


Abbildung 3.2: Stroboskopische Aufnahme des Phasenraums für  $\tilde{V}_0 = -10^{-4}$  und  $\tilde{V}_1 = 10^{-5}$ . 200 von links einlaufende Trajektorien mit Anfangsimpulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 10^{-3}$  und 0.05 sind dargestellt. Der Bereich innerhalb des Rechtecktopfes mit Impulsen zwischen ca.  $-0.0126$  und  $0.0126$  ist für Streubahnen nicht zugänglich.

Streubahnen erreichte Bereich für betragsmäßig kleine Impulse innerhalb des Wechselwirkungsbereichs ist deutlich größer als im vorangegangenen Fall mit  $\tilde{V}_1 \ll |\tilde{V}_0|$ .

In Abbildung 3.5 ist die Ablenkfunktion für dieselben Parameter dargestellt. Selbstähnliche Strukturen sind auch für diese Parameter nicht vorhanden. Wie erwartet ist jedoch die Anzahl der Unstetigkeiten in der Ablenkfunktion deutlich höher als für den Fall  $\tilde{V}_1 \ll |\tilde{V}_0|$ .

Das Verhalten der Verteilung der Aufenthaltszeiten stellt ein weiteres wichtiges Hilfsmittel zur Klassifizierung des Typs der Dynamik im betrachteten System dar (siehe Abschnitt 2.1 und [81, 101–104, 106]). Interessant ist dabei insbesondere das Verhalten für große Aufenthaltszeiten. Für den Rechtecktopf mit oszillierendem Boden läßt sich für den Fall anziehender Potentiale ( $\tilde{V}_0 < 0 < \tilde{V}_1 < |\tilde{V}_0|$ ) für  $\tilde{V}_1 \lesssim |\tilde{V}_0|$  und kleine Anfangsimpulse  $\tilde{p}_0$  ein algebraischer Abfall der Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten für große Zeiten  $\tau$  analytisch zeigen. Dieses Verhalten weist auf die Existenz regulärer Bereiche im Phasenraum hin, wie schon in Abschnitt 2.1, Seite 17 ff., disku-

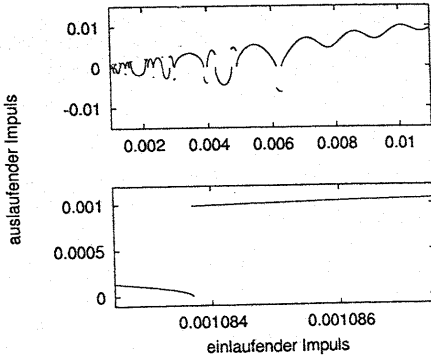


Abbildung 3.3: Ablenkfunktion für  $\tilde{V}_0 = -10^{-4}$  und  $\tilde{V}_1 = 10^{-5}$ .  $10^6$  mit der Anfangsphase  $\tau_0 = 0$  einlaufende Trajektorien für verschieden große Intervalle einlaufender Impulse wurden berechnet.

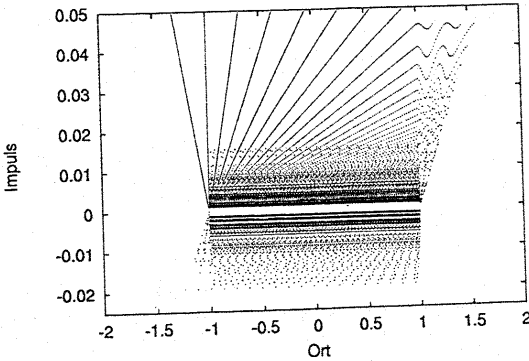


Abbildung 3.4: Stroboskopische Aufnahme des Phasenraums für  $\tilde{V}_0 = -10^{-4}$  und  $\tilde{V}_1 = 9.99 \cdot 10^{-5}$ , die restlichen Parameter wie in Abbildung 3.2.

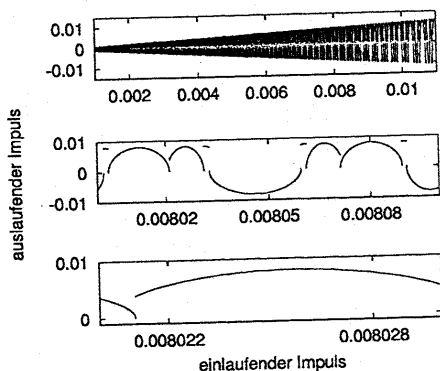


Abbildung 3.5: Ablenkfunktion für  $\tilde{V}_0 = -10^{-4}$  und  $\tilde{V}_1 = 9.99 \cdot 10^{-5}$ , die restlichen Parameter wie in Abbildung 3.3.

tiert wurde. Es gilt

$$P(\tau) \propto \frac{1}{\tau^3}, \quad \tau \gg 2\pi, \quad (3.10)$$

wie in Anhang E gezeigt wird. Der algebraische Abfall von  $P(\tau)$  läßt sich in diesem Fall mit dem schon beschriebenen Resonanzmechanismus erklären. Für ein quadratisches Billard mit einem kleinen Loch in einer der Wände wurde der gleiche, algebraische Abfall der Verteilung der Aufenthaltszeiten gefunden [106].

Abbildung 3.6 zeigt die numerisch berechneten Verteilungen der Aufenthaltszeiten in vier Fällen für festgehaltenes  $\tilde{V}_0$  und verschiedene  $\tilde{V}_1 \lesssim \tilde{V}_0$ . Der analytisch gefundene algebraische Abfall von  $P(\tau)$  ist in allen vier Fällen deutlich sichtbar. Für  $\tilde{V}_1 = 0.9 \cdot |\tilde{V}_0|$  ist der Abfall  $\propto \tau^{-3}$  über drei Größenordnungen sichtbar, für  $\tilde{V}_1 = 0.999 \cdot |\tilde{V}_0|$  sogar über fünf Größenordnungen.

Insgesamt läßt sich aus den analytischen Betrachtungen und deren Bestätigung durch die numerische Berechnung des algebraischen Abfalls der Verteilung der Aufenthaltszeiten, der ausschließlich regulären Strukturen in den stroboskopischen Phasenraumabbildungen und der Abwesenheit selbstähnlicher Strukturen in der Ablenkfunktion schließen, daß es sich bei dem hier betrachteten Rechtecktopf mit oszillierendem Boden um ein *pseudointegra-*

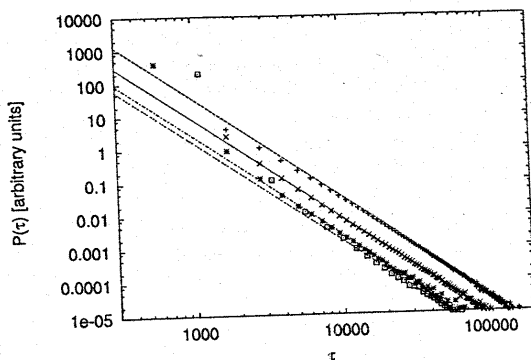


Abbildung 3.6: Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$  für die Streuung am Rechtecktopf mit oszillierendem Boden für festes  $\tilde{V}_0 = -10$  und verschiedene  $\tilde{V}_1$ :  $\tilde{V}_1 = -9.0$  (offene Quadrate),  $\tilde{V}_1 = -9.5$  (Sterne),  $\tilde{V}_1 = -9.9$  (diagonale Kreuze) und  $\tilde{V}_1 = -9.99$  (senkrechte Kreuze). Die eingezeichneten Linien sind durch  $\text{const} \times \tau^{-3}$  gegeben. Die Verteilungen  $P(\tau)$  sind nicht normiert.

bles System handelt.

### 3.1.2 Quantenmechanische Beschreibung der Streuung am Rechtecktopf mit oszillierendem Boden

Es wird nun die quantenmechanische Version des durch das Rechteckpotential mit oszillierendem Boden (3.1) definierten Streusystems behandelt. Dabei kommt die in Abschnitt 2.2.6, Seite 60 ff., beschriebene Methode zum Einsatz. In der Umsetzung der  $(t, t')$ -Methode (siehe Abschnitt 2.2.4, Seite 51 ff.) wird insbesondere so vorgegangen, wie es in Abschnitt 2.2.6 bei der Beschreibung von Streusystemen mit lokal begrenztem Antrieb, siehe Seite 63, in allgemeiner Form schon vorgestellt wurde. Es werden die in Abschnitt 2.2.3, Seite 46 ff., definierten totalen und partiellen Transmissionen und Reflexionen sowie die effektive Aufenthaltszeit berechnet (siehe Gleichungen (2.70), (2.77), (2.78) und (2.80) auf den Seiten 48-50).

Es sei an dieser Stelle angemerkt, daß im Falle stückweise konstanter Po-

tentiale, so wie es hier der Fall ist, die quantenmechanische Beschreibung auch im Rahmen einer erweiterten *Transfermatrixmethode* [66–68] durchgeführt werden kann. Dabei werden die in den einzelnen konstanten Bereichen des Potentials analytisch bekannten Lösungen der Schrödingergleichung zu einer festen Energie an den Sprungstellen so angepaßt, daß die Wellenfunktion sowie ihre erste Ableitung stetig sind. Der Vorteil der Transfermatrixmethode liegt darin, daß sie keine der Ungenauigkeiten enthält, die in der in dieser Arbeit verwendeten Wellenpaketpropagationsmethode aufgrund der endlichen Energieunschärfe der Wellenpakete entstehen. Sie besitzt jedoch den entscheidenden Nachteil, daß sie *ausschließlich* im Falle stückweise konstanter Potentiale anwendbar ist, in denen einzelne Bereiche periodisch in der Zeit entweder vertikal oszillieren [66–68] oder in denen ein elektrisches Wechselfeld vorhanden ist [69].

Analog zur Untersuchung der klassischen Streuung am Rechteckpotential mit oszillierendem Boden des letzten Abschnitts, wird zunächst das Verhalten des quantenmechanischen Systems unter der Variation der Amplitude  $V_1$  des zeitabhängigen Potentials untersucht. Für ausreichend hohe Frequenzen  $\omega$  befindet man sich im *diabatischen Grenzfall* (siehe auch Seite 43 ff.). In diesem Fall wirkt das zeitgemittelte Potential als effektives Potential und es sind Resonanzen bei Energien, die ein ganzzahliges Vielfaches der Photonenenergie  $\hbar\omega$  oberhalb der Energien der gebundenen Zustände des effektiven Potentials liegen, zu erwarten. Zu diesem Zweck wurden die Parameter des Potentials (3.1) als  $V_0 = -2$ ,  $L = 15$  und  $\omega = 1$  gewählt. Eine Abschätzung, die beweist, daß der diabatische Grenzfall für diese Parameter tatsächlich erreicht ist, wird im weiteren Verlauf noch angegeben. In allen nachfolgenden Untersuchungen wurde die Masse  $m$  des Teilchens gleich  $1/2$  gesetzt, und es wurde  $\hbar = 1$  gewählt.

Das zeitgemittelte Potential ist in diesem Fall gleich dem zeitunabhängigen Teil des Potentials (3.1) und ist daher ebenfalls rechteckförmig mit der Tiefe  $V_0$  und der Gesamtbreite  $2L$ . Die Energie  $l\hbar\omega$  ( $l \in \mathbb{N}$ ) oberhalb der Energie des  $n$ -ten gebundenen Zustandes des effektiven Potentials wird mit  $E_{n,l}$  bezeichnet.

Abbildung 3.7 zeigt die totale Transmission als Funktion der Energie des einlaufenden Teilchens für  $V_1 = 0^3$ ,  $V_1 = 0.2$ ,  $V_1 = 1$  und  $V_1 = |V_0| = 2$ .

<sup>3</sup> Auch im Falle  $V_1 = 0$  wurde die für zeitperiodische Potentiale geeignete Wellenpaketpropagationsmethode verwendet. Die Abweichung der auf diese Weise ermittelten Daten von der analytisch bekannten (totalen) Transmission des statischen Rechtecktopfs liegt

Erwartungsgemäß unterscheidet sich die totale Transformation für  $V_1 = 0.2$  nur recht wenig von der für  $V_1 = 0$  außer in der Nähe der Energien  $E_{n,l=1}$ . Die Linienform dieser Resonanzen läßt sich nicht durch eine Lorentzform beschreiben, was auf Interferenzeffekte mit der nichttrivialen Hintergrundstreuung am statischen Teil des Potentials zurückzuführen ist. Für  $V_1 = 1$  und  $V_1 = 2$  unterscheidet sich die totale Transmission von der des statischen Falls  $V_1 = 0$  deutlich und oszilliert mitunter stark. Auch in diesen Fällen lassen sich einige Resonanzen bei den entsprechenden Energien  $E_{n,l}$  erkennen. Es sind ebenfalls komplizierte Linienformen vorhanden, was ein Ablesen der genauen Resonanzenergien aus Abbildung 3.7 sehr erschwert.

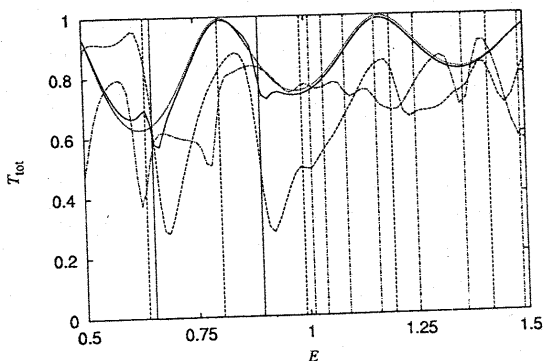


Abbildung 3.7: Totale Transmission  $T_{\text{tot}}$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  für  $V_0 = -2$ ,  $L = 15$ ,  $\omega = 1 = \hbar$ ,  $m = 0.5$  und verschiedene  $V_1$ :  $V_1 = 0$  punktierte,  $V_1 = 0.2$  durchgezogene,  $V_1 = 1$  gestrichelte und  $V_1 = 2$  strichpunktuierte Linie. Die Energien  $E_{n,l}$  sind mit vertikalen Linien markiert:  $l = 1$  durchgezogen,  $l = 2$  gestrichelt,  $l = 3$  strichpunktuiert.

Resonanzen in der totalen Transmission bei Energien  $E_{n,l}$  für die Streuung am Rechtecktopf mit oszillierendem Boden sind kürzlich auch von Burmeister und Maschke gefunden worden [71], wobei die in Referenz [70] entwickelte Methode, die ausschließlich im Falle stückweise konstanter Potentiale anwendbar

ist, verwendet wurde. Der statische Teil des dort betrachteten Topfes hatte jedoch nur zwei gebundene Zustände, so daß die Struktur der Transmission als Funktion der Energie deutlich einfacher war. Die in Abbildung 3.7 vorgestellten Daten sind unabhängig von Referenz [70] mit Hilfe der Wellenpaketpropagationsmethode berechnet worden.

Abbildung 3.8 zeigt den elastischen Kanal der Transmission, also den Kanal  $T_0(E)$ , als Funktion der einlaufenden Energie. Für  $V_1 = 0$  gilt natürlich  $T_{\text{tot}}(E) = T_0(E)$  und für  $V_1 = 0.2$  ist erkennbar, daß der elastische Kanal der mit Abstand wichtigste Kanal für die Transmission ist. Für  $V_1 = 1$  und  $V_1 = 2$  ist der elastische Kanal immer noch wichtig,  $T_0(E)$  kann aber für bestimmte Energien fast auf Null zurückgehen. Die Resonanzenergien lassen sich aus den Kurven für  $T_0(E)$  nur ähnlich ungenau wie aus denen für  $T_{\text{tot}}(E)$  ablesen.

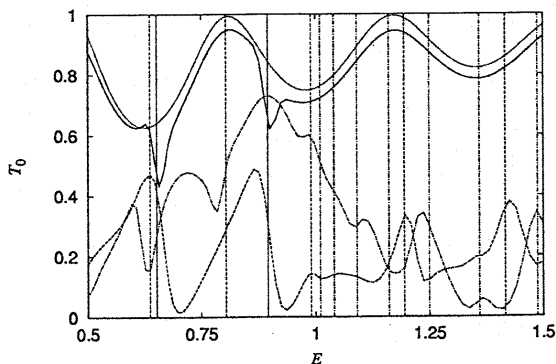


Abbildung 3.8: Elastischer Kanal  $T_0(E)$  der Transmission als Funktion der einlaufenden Energie  $E$ . Die restlichen Parameter sowie die Zuordnung der Linientypen wie in Abbildung 3.7.

In Abbildung 3.9 ist der Kanal  $T_1(E)$  der Transmission zu sehen, zu dem alle Prozesse der Transmission beitragen, bei denen die auslaufende Energie  $\hbar\omega$  höher als die einlaufende Energie ist. Für die Streuung am zeitunabhängigen Potential, also im Fall  $V_1 = 0$ , gilt natürlich  $T_1(E) = 0$ . Für  $V_1 = 0.2$  ist, wie aus den Kurven von  $T_{\text{tot}}(E)$  und von  $T_0(E)$  folgt,  $T_1(E)$  recht klein, die



Resonanzen bei  $E_{n,1}$  sind jedoch deutlich sichtbar. Für  $V_1 = 1$  und  $V_1 = 2$  hingegen leistet dieser Kanal der Transmission einen wesentlichen Beitrag zur totalen Transmission.

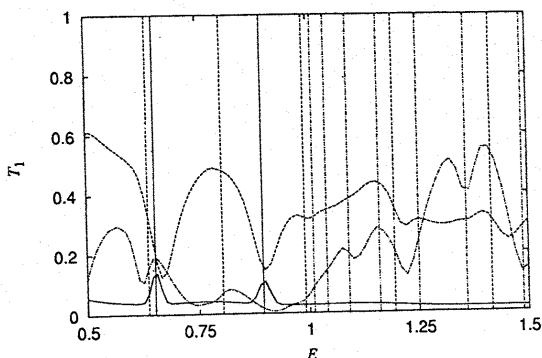


Abbildung 3.9: Kanal  $T_1(E)$  der Transmission als Funktion der einlaufenden Energie  $E$ . Die restlichen Parameter sowie die Zuordnung der Linientypen wie in Abbildung 3.7.

In Abbildung 3.10 ist die effektive Aufenthaltszeit  $W(E)$  (siehe Gleichung (2.80), Seite 50) für dieselben Parameter zu sehen. Ausgeprägte Maxima bei den zu erwartenden Resonanzenergien  $E_{n,l}$  sind deutlich sichtbar. Diese Maxima sind deutlich schärfer ausgeprägt, als die schon im statischen Fall vorhandenen Maxima und Minima. Für  $V_1 = 0.2$  unterscheidet sich die effektive Aufenthaltszeit nur wenig von der des statischen Falls  $V_1 = 0$ , außer bei den Resonanzenergien  $E_{n,1}$ , so wie es aufgrund der Form der totalen Transmission auch schon zu erwarten war. In diesem Fall ist die Amplitude  $V_1$  des zeitabhängigen Potentials so klein, daß Resonanzen zu höheren  $l$ , also *Multiphotonenprozesse*, nicht angeregt werden. Für  $V_1 = 1$  und  $V_1 = 2$  sind dagegen auch Resonanzen bei  $E_{n,l=2,3}$  deutlich erkennbar. Für  $V_1 = 2$  ist ferner sichtbar, daß die beiden im betrachteten Energieintervall liegenden ( $l = 1$ )-Resonanzen, zugunsten benachbarter ( $l = 2$ )-Resonanzen "entvölkert" worden sind. Somit tragen *nichtlineare* Effekte in  $V_1$  einen großen Teil zur Streuung am zeitperiodischen Potential bei.

Schließlich beweist Abbildung 3.10, daß es sich bei der in Gleichung (2.80), Seite 50, definierten effektiven Aufenthaltszeit  $W$  um eine sehr effiziente Größe zur Bestimmung von Resonanzenergien handelt.

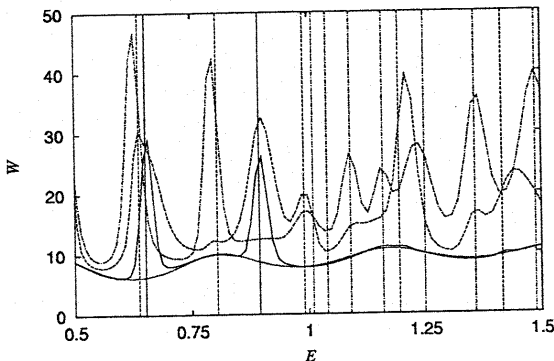


Abbildung 3.10: Effektive Aufenthaltszeit  $W(E)$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$ . Die restlichen Parameter sowie die Zuordnung der Linientypen wie in Abbildung 3.7.

Zur besseren Illustration der nichtlinearen Effekte in  $V_1$  sowie der Anwendbarkeit der einfachen Erklärung der Resonanzpositionen mit Hilfe eines effektiven Potentials, das in diesem Fall durch das zeitgemittelte Potential gegeben ist, ist in Abbildung 3.11 die effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  und der Amplitude  $V_1$  dargestellt. Die Höhe der Resonanzpeaks läßt sich für größere  $V_1$  keinesfalls durch eine in  $V_1$  lineare Näherung beschreiben, wie das Verschwinden einer der Peaks für große  $V_1$  verdeutlicht. Die zu den Peaks gehörenden Resonanzenergien verändern sich als Funktion von  $V_1$  nur wenig, so wie es die modellhafte Erklärung mit Hilfe eines effektiven Potentials in diesem Fall auch vorhersagt.

Wird die Amplitude  $V_1$  des zeitperiodischen Potentials festgehalten, während die Frequenz  $\omega$  des Potentials variiert wird, so ist eine in  $\omega$  lineare Veränderung der Resonanzenergien zu erwarten, sofern durch die Variation von  $\omega$  nicht der diabatische Bereich verlassen wird. In Abbildung 3.12 sind die aus den Daten der effektiven Aufenthaltszeit  $W$  abgelesenen Resonanz-

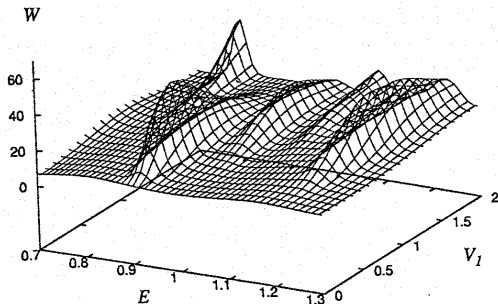


Abbildung 3.11: Effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  und der Amplitude  $V_1$  für  $V_0 = -2$ ,  $L = 15$ ,  $\omega = 1 = \hbar$ ,  $m = 0.5$ .

energien als Funktion der antreibenden Frequenz  $\omega$  für  $V_0 = -2$ ,  $V_1 = 1.8$  und  $L = 15$  in der  $\omega$ - $E$ -Ebene zu sehen. Die betrachteten Frequenzen liegen zwischen  $\omega = 0.7$  und  $2.5$ , wodurch in allen Fällen der diabatische Bereich erreicht ist: Die Topftiefe von  $|V_0| = 2$  ist eine obere Schranke für die maximal mögliche kinetische Energie eines im zeitgemittelten Potentials gefangenen Teilchens. Ein (klassisches) Teilchen der Masse  $m = 0.5$  legt die Strecke  $2L$  in der Zeit  $\tau_{kl} = (2mL)/p = 15 \gtrsim 4\pi$  zurück, wobei  $p$  den Impuls des Teilchens bezeichnet. Die Periode der Oszillation des Potentials liegt im Bereich  $(10/7) \cdot 2\pi \geq T \geq (2/5) \cdot 2\pi$ , so daß in allen Fällen  $\tau_{kl} > T$  gilt, wodurch ein gefangenes Teilchen stets das zeitgemittelte Potential "spürt".

Abbildung 3.12 zeigt deutlich die zu erwartende Übereinstimmung der aus den Peakpositionen in  $W(E)$  abgelesenen Resonanzenergien mit den Energien  $E_{n,l}$ . Ferner bestätigt Abbildung 3.12 nochmals, daß die in der Transmission bzw. in der effektiven Aufenthaltszeit vorhandenen, in  $V_1$  nichtlinearen Effekte nicht die Gültigkeit der Vorhersagen der möglichen Resonanzenergien mit Hilfe des effektiven Potentials einschränken. Die in  $V_1$  nichtlinearen Effekte können jedoch dazu führen, daß bei einzelnen Energien  $E_{n,l}$  keine Resonanzen zu beobachten sind (siehe auch Abbildung 3.11).

Es bleibt anzumerken, daß der hier untersuchte Parameterbereich des Rechteckpotentials mit oszillierendem Boden in einem rein quantenmechanischen Regime liegt, da sich die Charakteristika der Transmission und der

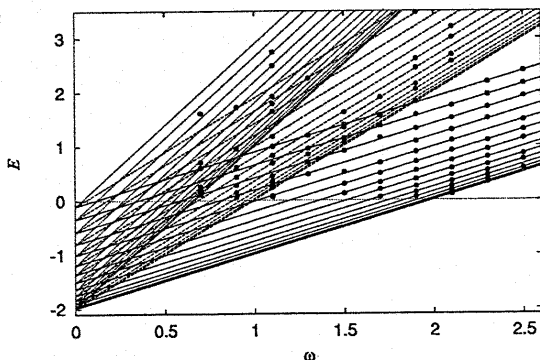


Abbildung 3.12: Resonanzpositionen (ausgefüllte Kreise) in der  $\omega$ - $E$ -Ebene für  $V_0 = -2$ ,  $V_1 = 1.8$ ,  $L = 15$ ,  $\hbar = 1$  und  $m = 0.5$ . Die Energien  $E_{n,l} = E_n + l\hbar\omega$  sind ebenfalls eingezeichnet:  $l = 1$  durchgezogene,  $l = 2$  gestrichelte,  $l = 3$  punktierte Linien.

effektiven Aufenthaltszeit mit Hilfe rein quantenmechanischer Überlegungen erklären lassen.

Als Schlußbemerkung sollte nicht unerwähnt bleiben, daß die hier verwendete Methode und damit auch die erhaltenen Ergebnisse über die Behandlung im Rahmen der Tien-Gordon-Theorie [39] hinausgehen, da in einer solchen Behandlung weder die Wellenfunktion noch ihre erste Ableitung an den Sprungstellen des Potentials stetig sind (siehe Anhang A und [1]).

## 3.2 Oszillierendes $1/\cosh^2$ -Potential

In diesem Abschnitt wird ein stetiges Streupotential betrachtet. Dabei handelt es sich wiederum um einen Potentialtopf, dessen Boden vertikal harmonisch oszilliert. Das Potential ist durch

$$V(x, t) = \frac{V_0 + V_1 \cos(\omega t)}{\left(\cosh\left(\frac{x}{L}\right)\right)^2} \quad (3.11)$$

gegeben und in Abbildung 3.13 skizziert. Die Hamiltonfunktion dieses Systems ist durch Gleichung (2.1), Seite 12, gegeben. Ebenso wie im Fall des im letzten Abschnitt behandelten Rechtecktopfs mit oszillierendem Boden fällt das Potential (3.11) für  $|x| \rightarrow \infty$  schnell genug ab, so daß sich das gestreute Teilchen asymptotisch frei bewegt.

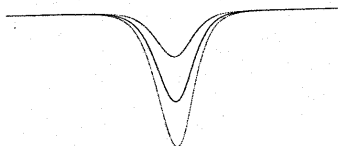


Abbildung 3.13: Oszillierendes  $1/\cosh^2$ -Potential

Die Streuung an einem periodisch gekickten  $1/\cosh^2$ -Potential wurde von Gerwinsky und Šeba sowohl klassisch als auch quantenmechanisch untersucht [82]. Im Rahmen der klassischen Beschreibung wurde dabei chaotische Streuung gefunden. Insbesondere wurde der Einfluß der Struktur des klassischen Phasenraums auf das Verhalten des Systems in der quantenmechanischen Beschreibung untersucht.

### 3.2.1 Klassische Beschreibung der Streuung am oszillierenden $1/\cosh^2$ -Potential

In Analogie zum Rechtecktopf mit oszillierendem Boden zeigt ein Vergleich von Gleichung (3.11) mit Gleichung (2.4), Seite 19, daß auch hier die Betrachtung des in dimensionslosen Größen (siehe Gleichung (2.5)) ausgedrückten Systems genügt. Das zu betrachtende dynamische System ist somit durch

$$\tilde{H}(\tilde{x}, \tilde{p}, \tau) = \frac{\tilde{p}^2}{2} + \frac{\tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos \tau}{(\cosh \tilde{x})^2}, \quad (3.12)$$

$$\dot{\tilde{x}} = \frac{d\tilde{x}}{d\tau} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{p}} = \tilde{p}, \quad (3.13)$$

$$\dot{\tilde{p}} = \frac{d\tilde{p}}{d\tau} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial \tilde{x}} = -2 \frac{\sinh \tilde{x}}{(\cosh \tilde{x})^3} (\tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos \tau) \quad (3.14)$$

gegeben. Auch in diesem Fall stellen die beiden reduzierten Potentialstärken  $\tilde{V}_0$  und  $\tilde{V}_1$  die freien Parameter dar.

Betrachtet man zunächst den integrablen Fall  $\tilde{V}_1 = 0$  und erweitert den eigentlich zweidimensionalen Phasenraum auf drei Dimensionen ( $\tilde{x} \in \mathbb{R}, \tilde{p} \in \mathbb{R}, \tau \in [0, 2\pi)$ ), wobei  $\tau = 0$  und  $\tau = 2\pi$  miteinander identifiziert werden, so bewegen sich in der Potentialmulde gefangene Bahnen mit negativer Gesamtenergie auf Tori. Das Einschalten des zeitabhängigen Teils des Potentials ( $\tilde{V}_1 \neq 0$ ) eröffnet nun die Möglichkeit der Zerstörung dieser Tori.

Zur genaueren Untersuchung des möglichen Aufbrechens der Tori und zur Erstellung stroboskopischer Phasenraumbilder sowie zur Berechnung der Ablenkfunktion und der Verteilung der Aufenthaltszeiten (siehe Abschnitt 2.1, Seite 15 ff., für die entsprechenden Definitionen) werden die Bewegungsgleichungen (3.13) und (3.14) numerisch integriert<sup>4</sup>. Als Wechselwirkungsbereich, außerhalb dessen sich das Teilchen frei bewegt, sei hier der Bereich  $-10 < \tilde{x} < 10$  definiert ( $1/(\cosh(10))^2 \approx 8 \cdot 10^{-9}$ ).

Genauso wie im Falle des Rechtecktopfs mit oszillierendem Boden hat sich bei diesen Untersuchungen gezeigt, daß die dynamischen Eigenschaften des betrachteten Systems weitgehend durch das Verhältnis  $|\tilde{V}_1/\tilde{V}_0|$  der Potentialstärken bestimmt werden, während Variationen des absoluten Wertes von  $\tilde{V}_0$  bei konstantem  $|\tilde{V}_1/\tilde{V}_0|$  nur geringe Änderungen nach sich ziehen. Aus diesem Grunde werden auch hier die "Extremfälle"  $\tilde{V}_1 \ll |\tilde{V}_0|$  und  $\tilde{V}_1 = |\tilde{V}_0|$  untersucht, wobei der absolute Wert von  $\tilde{V}_0$  dem jeweiligen Typ der Untersuchung angepaßt wird.

Abbildung 3.14 zeigt eine stroboskopische Abbildung des Phasenraums für den Fall  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.004$ . Alle dargestellten Trajektorien laufen von links ein und erreichen dabei den Wechselwirkungsbereich zum Zeitpunkt  $\tau_0 = \pi/2$ . Ein großer Bereich des Phasenraums um den Ursprung ( $\tilde{x} = 0, \tilde{p} = 0$ ) ist für Streubahnen nicht zugänglich. In der Nähe dieser verbotenen Zone ist ein chaotischer Bereich sichtbar. Ferner sind zudem reguläre Bereiche vorhanden.

Der für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.004$  von Streubahnen nicht erreichte Bereich ist in Abbildung 3.15 dargestellt. Zu diesem Zweck wurden  $\tilde{x}_0 = 0$ ,  $\tilde{p}_0 > 0$  und  $\tau_0 = \pi/2$  als Anfangsbedingungen gewählt. Für Anfangsimpulse kleiner als ca. 0.75 kann das Teilchen den Wechselwirkungsbereich auch nach sehr langen Zeiten noch nicht verlassen. Der von diesen Anfangsbedingungen ausgefüllte Bereich des Phasenraums ist regulär und wird von einer großen Stabilitätsinsel, deren Zentrum im Ursprung des Phasenraumes liegt, domi-

<sup>4</sup>Zu Testzwecken wurden dabei zwei verschiedene Algorithmen (Runge-Kutta-Merson und Adams [124]) verwendet, die die gleichen Ergebnisse liefern.

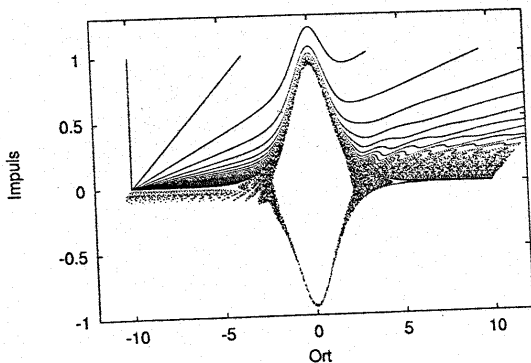


Abbildung 3.14: Stroboskopisches Phasenraumbild für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.004$ . Dargestellt sind 1000 von links einlaufende Streubahnen mit einlaufenden Impulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 10^{-3}$  und 1.

niert. Es sind außerdem noch Ketten kleinerer Inseln erkennbar. Teilchen mit größeren Anfangsimpulsen können den Wechselwirkungsbereich, wenn auch nach einer eventuell immer noch sehr großen Aufenthaltsdauer (siehe auch Abschnitt 2.1, Seite 17), verlassen. Das reguläre Gebiet um den Ursprung des Phasenraums ist von einem chaotischen Bereich umgeben, der für Streubahnen zugänglich ist.

In Abbildung 3.16 ist die Ablenkfunktion für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.004$  dargestellt. Berücksichtigt wurde eine große Anzahl Streubahnen mit einlaufenden Impulsen aus verschiedenen großen Intervallen. Alle dargestellten Trajektorien laufen in derselben Phasenlage der Oszillation des Potentials in den Wechselwirkungsbereich ein. Selbstähnliche Strukturen sind deutlich sichtbar, somit ist im dynamischen Fluß topologisches Chaos vorhanden [96].

Abbildung 3.17 zeigt eine stroboskopische Abbildung des Phasenraums für den Fall  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.4$ . Auch in diesem Fall laufen alle dargestellten Trajektorien von links ein und erreichen den Wechselwirkungsbereich zum Zeitpunkt  $\tau_0 = \pi/2$ . In diesem Fall ist nur ein kleiner Bereich des Phasenraums um den Ursprung für Streubahnen nicht zugänglich. Dieses Gebiet ist von einem großen chaotischen Bereich umgeben.

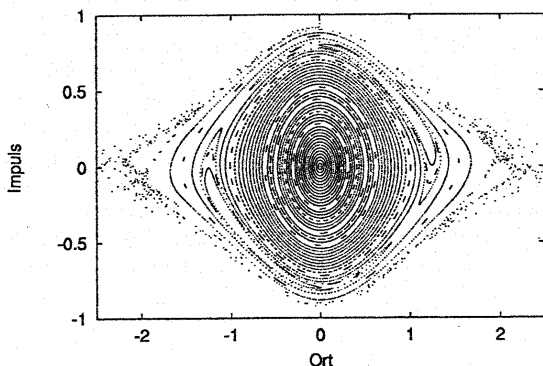


Abbildung 3.15: Stroboskopisches Phasenraumbild für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.004$ . Dargestellt sind 60 Trajektorien, die bei  $\tilde{x}_0 = 0$  mit Impulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 10^{-3}$  und 1.2 zum Zeitpunkt  $\tau_0 = \pi/2$  starten.

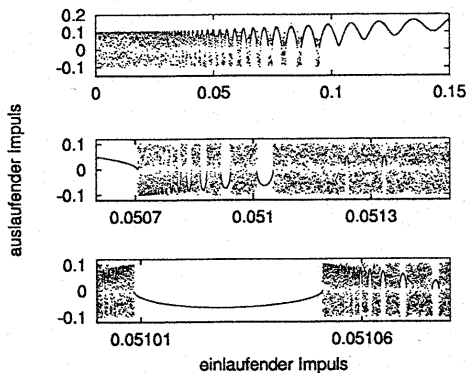


Abbildung 3.16: Selbstähnliche Ablenkfunktion für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.004$ .



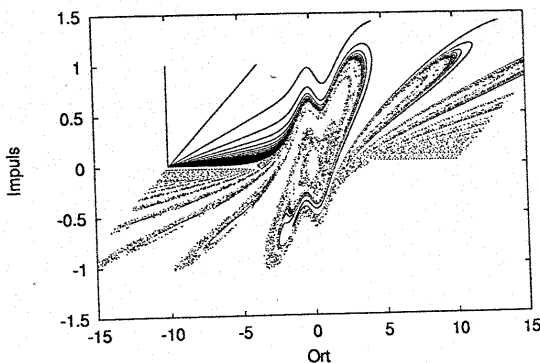


Abbildung 3.17: Stroboskopisches Phasenraumbild für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.4$ . Dargestellt sind 2000 von links einlaufende Streubahnen mit einlaufenden Impulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 10^{-3}$  und 1.

Der für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.4$  von Streubahnen nicht erreichte Bereich ist in Abbildung 3.18 dargestellt. Zu diesem Zweck wurden wiederum  $\tilde{x}_0 = 0$ ,  $\tilde{p}_0 > 0$  und  $\tau_0 = \pi/2$  als Anfangsbedingungen gewählt. Für Anfangsimpulse kleiner als ca. 0.1 hält sich das Teilchen auch nach sehr langer Zeit immer noch im Wechselwirkungsbereich auf. Der von diesen Anfangsbedingungen ausgefüllte Bereich des Phasenraums ist regulär und wird von einer Stabilitätsinsel, deren Zentrum im Ursprung des Phasenraumes liegt, dominiert. Die Insel ist allerdings deutlich kleiner als im vorigen Fall  $\tilde{V}_1 \ll |\tilde{V}_0|$ . Es sind außerdem noch Ketten kleinerer Inseln erkennbar. Teilchen mit größeren Anfangsimpulsen können den Wechselwirkungsbereich, wiederum nach eventuell sehr großen Aufenthaltszeiten, verlassen. Das reguläre Gebiet um den Ursprung des Phasenraums ist auch hier von einem für Streubahnen zugänglichen, chaotischen Bereich umgeben.

In Abbildung 3.19 ist die Ablenkfunktion für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.4$  dargestellt. Selbstähnliche Strukturen sind deutlich sichtbar, somit handelt es sich auch in diesem Fall um chaotische Streuung.

Abbildung 3.20 zeigt eine stroboskopische Phasenraumabbildung für den Fall  $\tilde{V}_0 = -5$  und  $\tilde{V}_1 = 5$ . Die zu erkennenden Strukturen ähneln stark den im

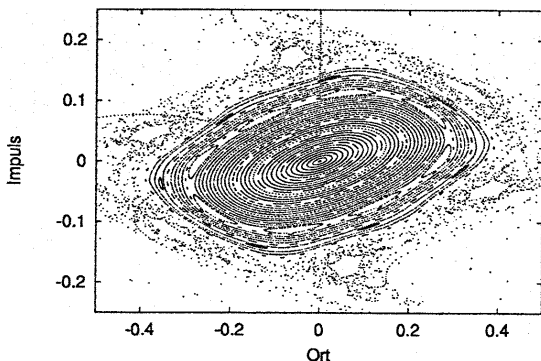


Abbildung 3.18: Stroboskopisches Phasenraumbild für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.4$ . Dargestellt sind 200 Trajektorien, die bei  $\tilde{x}_0 = 0$  mit Impulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 10^{-3}$  und  $3.5 \cdot 10^{-3}$  zum Zeitpunkt  $\tau_0 = \pi/2$  starten.

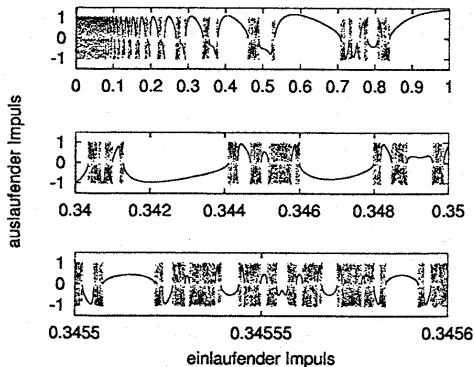


Abbildung 3.19: Selbstähnliche Ablenkfunktion für  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.4$ .

Fall  $\tilde{V}_0 = -0.4$  und  $\tilde{V}_1 = 0.4$  gefundenen Ergebnissen, siehe Abbildung 3.17.

Aufgrund der größeren absoluten Werte für  $|\tilde{V}_0| = \tilde{V}_1$  ist jedoch der für gleiche einlaufende Impulse zugängliche Bereich des Phasenraums größer. In beiden hier betrachteten Fällen mit  $|\tilde{V}_0| = \tilde{V}_1$  wurde eine kleine Stabilitätsinsel gefunden, deren Zentrum im Ursprung des Phasenraums liegt.

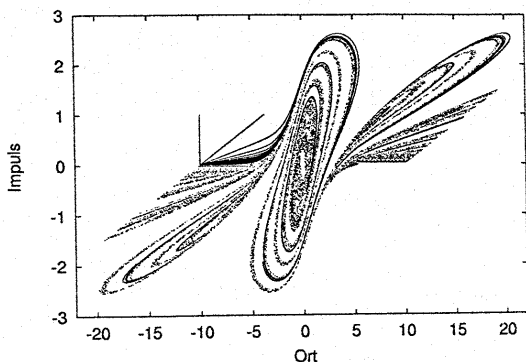


Abbildung 3.20: Stroboskopisches Phasenraumbild für  $\tilde{V}_0 = -5$  und  $\tilde{V}_1 = 5$  mit  $10^4$  von links einlaufende Streubahnen mit einlaufenden Impulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 10^{-3}$  und 1.

In Abbildung 3.21 ist die Verteilung der Aufenthaltszeiten für den Fall  $\tilde{V}_0 = -5$  und  $\tilde{V}_1 = 5$  zu sehen. Für große Aufenthaltszeiten  $\tau$  fällt die Verteilung  $P(\tau)$  algebraisch ab. Dabei sind zwei Zeitskalen deutlich zu erkennen: Für Aufenthaltszeiten  $\tau \lesssim 2.7 \cdot 10^{19}$  fällt die Verteilung wie  $P(\tau) \propto \tau^{-0.32}$  ab, während  $P(\tau) \propto \tau^{-1.21}$  für  $\tau \gtrsim 2.7 \cdot 10^{19}$  gilt.

Eine Existenz von zwei Zeitskalen in der Verteilung der Aufenthaltszeiten ist auch in Referenz [89] für ein System festgestellt worden, in dem nichthyperbolische, chaotische Streuung vorhanden ist. Dabei wurden Argumente dafür gefunden, daß ein solches Verhalten typisch für nichthyperbolische, chaotische Streusysteme ist.

Es ist an dieser Stelle anzumerken, daß das Verhalten der Verteilung der Aufenthaltszeiten in der klassischen Beschreibung meßbare Auswirkungen auf das Verhalten des entsprechenden quantisierten Systems hat [104]. Dabei wurden die Leitfähigkeitsfluktuationen in zweidimensionalen zeitunabhängi-

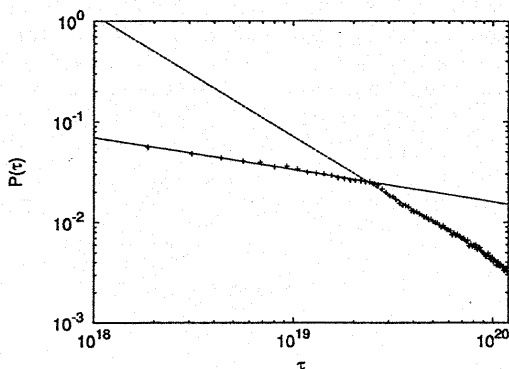


Abbildung 3.21: Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$ . Zwei Zeitskalen sind deutlich sichtbar: Für  $\tau \lesssim 2.7 \cdot 10^{19}$  gilt  $P(\tau) \propto \tau^{-0.32}$  während für  $\tau \gtrsim 2.7 \cdot 10^{19}$  der Abfall der Verteilung durch  $P(\tau) \propto \tau^{-1.21}$  gegeben ist.

gen Systemen untersucht.

In den beiden vorgestellten Parameterbereichen,  $\tilde{V}_1 \ll |\tilde{V}_0|$  und  $\tilde{V}_1 = |\tilde{V}_0|$ , sind im Phasenraum sowohl chaotische als auch reguläre Bereiche vorhanden und die entsprechenden Ablenkfunktionen besitzen selbstähnliche Strukturen. Insbesondere hängen die Strukturen des Phasenraums in erster Linie vom Verhältnis  $|\tilde{V}_1/\tilde{V}_0|$  der Amplitude zur mittleren Tiefe des Potentials ab. Die absoluten Werte hingegen beeinflussen die Phasenraumstrukturen nur wenig. Für den Fall  $\tilde{V}_1 = |\tilde{V}_0|$ , in dem große chaotische Bereiche im Phasenraum vorhanden sind, fällt die Verteilung der Aufenthaltszeiten für große Zeiten algebraisch ab, was ebenfalls auf die Existenz regulärer Bereiche im Phasenraum hinweist. Das durch die Gleichungen (3.13) und (3.14) definierte dynamische System ist – für den hier untersuchten Parameterbereich – als *gemischtes System* zu bezeichnen und ist somit *nichthyperbolisch*.

### 3.2.2 Quantenmechanische Beschreibung der Streuung am oszillierenden $1/\cosh^2$ -Potential

Es soll nun die quantenmechanische Version des durch das Potential (3.11) definierten Streusystems untersucht werden. Ebenso wie bei der Behandlung des Rechteckpotentials mit oszillierendem Boden in Abschnitt 3.1.2, Seite 75 ff., werden zu diesem Zweck die in Abschnitt 2.2.3, Seite 46 ff., definierten totalen und partiellen Transmissionen und Reflexionen sowie die effektive Aufenthaltszeit berechnet (siehe Gleichungen (2.70), (2.77), (2.78) und (2.80) auf den Seiten 48-50). Im Vergleich zur Behandlung des Rechteckpotentials mit oszillierendem Boden ist es lediglich erforderlich, die Form des Potentials (in der verwendeten Ebenen-Wellen-Basis, siehe Abschnitt 2.2.6, Seite 60 ff.) in der numerischen Implementierung der Wellenpaketpropagationsmethode zu ändern. Als Wechselwirkungsbereich wurde  $-4L \leq x \leq 4L$  definiert ( $\cosh^{-2}(4) \approx 1.3 \cdot 10^{-3}$ ).

Es sollen die Auswirkungen der Variation der Stärke des zeitperiodischen Antriebs untersucht werden. Dazu werden die totalen und partiellen Transmissionen und Reflexionen sowie die effektive Aufenthaltszeit für einen konstant gehaltenen zeitunabhängigen Teil des Potentials (3.11) für verschiedene Amplituden des zeitperiodischen Teils des Potentials berechnet. Es wird der Fall  $V_0 = -3$ ,  $L = 5$ ,  $\omega = 1$  für ein Teilchen der Masse  $m = 1/2$  betrachtet, wobei  $\hbar = 1$  gesetzt wurde. Die Amplitude des Potentials wird im Bereich  $0 \leq V_1 \leq |V_0|$  variiert.

Abbildung 3.22 zeigt die totale Transmission  $T_{\text{tot}}$  als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens für die obigen Parameter in den Fällen  $V_1 = 0.3, 1.5$  und  $3$ . Für  $V_1 = 0$ , also im Fall der Streuung am statischen Teil des Potentials, ist die Transmission  $T_{\text{tot}}(E) \simeq 1$ , so daß sie im hier benutzten Maßstab nicht von der Konstante 1 unterschieden werden kann. Auch in diesem Fall ist die Transmission analytisch bekannt [125] und ein Vergleich der mit der Wellenpaketpropagationsmethode berechneten Transmission ergab eine Abweichung von ca. einem Prozent. Für  $V_1 = 0.3$  sind Minima in der Transmission bei drei der vier im betrachteten Energieintervall liegenden Energien  $E_{n,l=1}$  zu sehen. Dabei ist  $E_{n,l} = E_n + l\hbar\omega$  und  $E_n < 0$  bezeichnet die Energie des  $n$ -ten gebundenen Zustands im statischen Teil des Potentials, also einem  $1/\cosh^2(x/L)$ -förmigen Potential der Tiefe  $|V_0|$ . Für  $V_1 = 1.5$  und  $3$  unterscheidet sich die totale Transmission deutlich vom konstanten Wert 1 und an einigen der  $E_{n,l}$  sind Resonanzen als ausgeprägte Minima der Transmission erkennbar. Verglichen mit der Streuung am Recht-

ecktopf mit oszillierendem Boden (siehe Abbildung 3.7, Seite 77) ist eine Bestimmung der Resonanzenergien aus den Daten der totalen Transmission leichter möglich, da die Transmission der Streuung am statischen Teil des  $1/\cosh^2(x)$ -Potentials (nahezu) konstant ist und eventuell auftretende Interferenzen mit dieser "Hintergrundstreuung" am statischen Teil des Potentials weniger kompliziert sind.

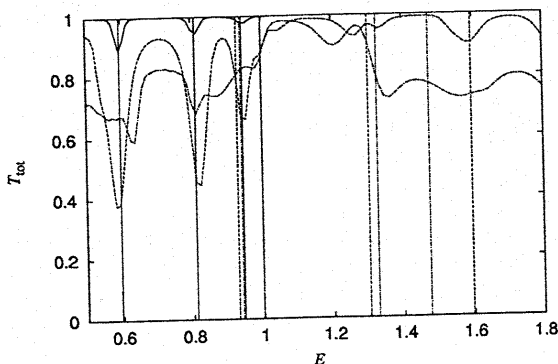


Abbildung 3.22: Totale Transmission  $T_{\text{tot}}$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  für  $V_0 = -3$ ,  $L = 5$ ,  $\omega = 1 = \hbar$ ,  $m = 0.5$  und verschiedene  $V_1$ :  $V_1 = 0.3$  durchgezogene,  $V_1 = 1.5$  gestrichelte und  $V_1 = 3$  strichpunktierte Linie. Die Energien  $E_{n,l}$  sind mit vertikalen Linien markiert:  $l = 1$  durchgezogen,  $l = 2$  gestrichelt,  $l = 3$  strichpunktiert,  $l = 4$  punktiert.

In Abbildung 3.23 ist der elastische Kanal  $T_0$  der Transmission als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens zu sehen. Für  $V_1 = 0.3$  liegt  $T_0(E)$  im gezeigten Energieintervall stets bei ungefähr 0.95, außer an den schon in der totalen Transmission sichtbaren Resonanzen, die wiederum als Minima auftreten. Somit ist, wie erwartet, in diesem Fall der elastische Kanal der wichtigste Kanal der Transmission. Für  $V_1 = 1.5$  und 3 ist  $T_0(E)$  für alle dargestellten  $E$  kleiner als 0.4, woraus folgt, daß für größere Amplituden  $V_1$  mehrere Kanäle wichtige Beiträge zur totalen Transmission liefern. Insbesondere sind die Beiträge der inelastischen Kanäle von derselben Größenordnung wie der des elastischen Kanals, wie sich aus den Daten für

$T_{\text{tot}}(E)$  und  $T_0(E)$  ersehen läßt. Ebenso wie im Falle des Rechtecktopfs mit oszillierendem Boden ist, zumindest für größere Amplituden, der elastische Kanal der Transmission nur wenig zur Bestimmung der Resonanzenergien geeignet.

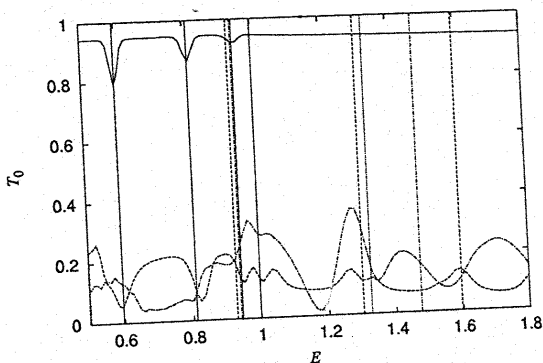


Abbildung 3.23: Elastischer Kanal  $T_0(E)$  der Transmission als Funktion der einlaufenden Energie  $E$ . Die restlichen Parameter sowie die Zuordnung der Linientypen wie in Abbildung 3.22.

Abbildung 3.24 zeigt den Kanal  $T_1$  der Transmission. Für den Fall  $V_1 = 0.3$  ist erkennbar, daß  $T_{\text{tot}}(E) \approx T_0(E) + T_1(E)$  im betrachteten Energieintervall gilt. Ferner sind die Resonanzen nur schwach als Maxima sichtbar. Im Fall  $V_1 = 1.5$  ist  $T_1(E) \gtrsim T_0(E)$ , somit stellen auch in diesem Fall diese beiden Kanäle den wichtigsten Beitrag zu  $T_{\text{tot}}(E)$  dar. Für  $V_1 = 3$  ist  $T_1(E)$  hingegen recht klein, so daß in diesem Fall noch weitere inelastische Kanäle der Transmission wichtige Beiträge zur totalen Transmission liefern.

Abbildung 3.25 zeigt die effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens für dieselben Parameter wie in den vorangegangenen Abbildungen. Neben den deutlich sichtbaren Peaks bei  $E_{n,l=1}$  ist für  $V_1 = 1.5$  und  $3$  auch ein ( $l = 4$ )-Resonanzpeak erkennbar. Wie im Falle der Streuung am Rechtecktopf mit oszillierendem Boden ist auch in diesem Fall die effektive Aufenthaltszeit zur Bestimmung von Resonanzenergien deutlich besser geeignet als die totale oder einzelne Kanäle der Transmission.

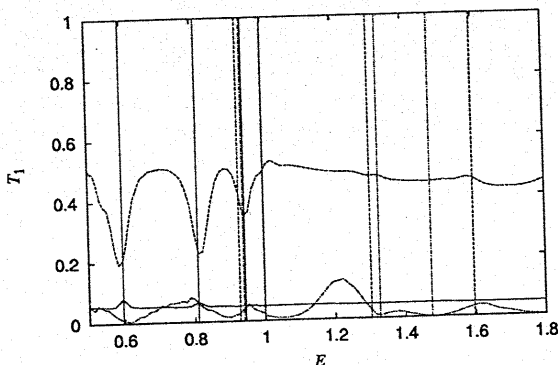


Abbildung 3.24: Kanal  $T_1(E)$  der Transmission als Funktion der einlaufenden Energie  $E$ . Die restlichen Parameter sowie die Zuordnung der Linientypen wie in Abbildung 3.22.

Die meisten Resonanzpeaks liegen bei einer der Energien  $E_{n,l}$ , somit ist für die gewählten Parameter der diabatische Fall erreicht (siehe Abschnitt 2.2.3, Seite 46 ff.). Die Abweichungen der aus den Daten der effektiven Aufenthaltszeit bestimmten Resonanzpositionen von den Energien  $E_{n,l}$ , die sich aus der modellhaften Beschreibung des diabatischen Grenzfalles mit Hilfe eines durch das zeitgemittelte Potential gegebenen effektiven Potentials ergeben, sind jedoch größer als im Falle des Rechtecktopfs mit oszillierendem Boden.

In Abbildung 3.26 ist schließlich die effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens und der Amplitude  $V_1$  des Potentials zu sehen. Nichtlineare Effekte in  $V_1$  sind deutlich sichtbar. Die am stärksten ausgeprägten Resonanzpeaks ändern ihre Position in der Energie  $E$  als Funktion von  $V_1$  nur unwesentlich. Ferner sind einige schwächere Peaks erkennbar, deren Position stark von  $V_1$  abhängt.

Insgesamt zeigen die vorgestellten Daten, daß sich das durch das  $1/\cosh^2$ -Potential (3.11) definierte System im betrachteten Parameterbereich in einem rein quantenmechanischen Regime befindet. Die berechneten Daten der Transmission und der effektiven Aufenthaltszeit lassen sich völlig analog zu denen des Rechtecktopfs mit oszillierendem Boden interpretieren.



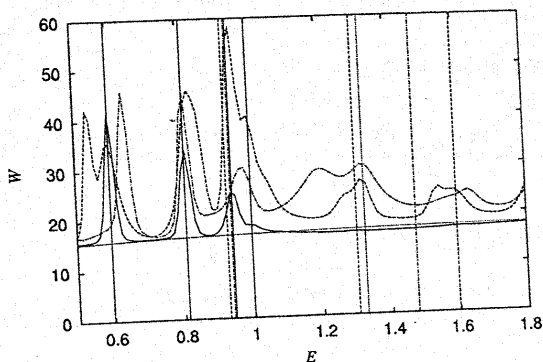


Abbildung 3.25: Effektive Aufenthaltszeit  $W(E)$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$ . Die punktierte Linie zeigt  $W(E)$  für den Fall  $V_1 = 0$ . Die restlichen Parameter sowie die weitere Zuordnung der Linientypen wie in Abbildung 3.22.

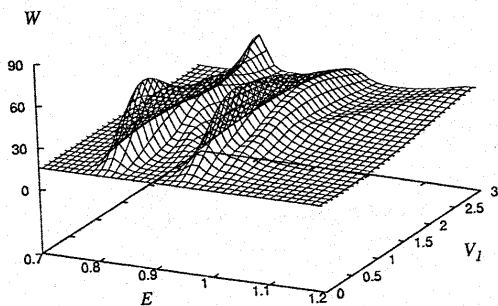


Abbildung 3.26: Effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  und der Amplitude  $V_1$  für  $V_0 = -3$ ,  $L = 5$ ,  $\omega = 1 = \hbar$ ,  $m = 0.5$ .

# Kapitel 4

## Streusysteme mit wechselstromartigem Antrieb

Es soll nun die Streuung an zeitperiodischen Potentialen, deren Zeitabhängigkeit durch einen wechselstromartigen Antrieb hervorgerufen wird, untersucht werden. Im Rahmen der Behandlung der Kramers-Henneberger-Transformation wurde gezeigt, daß sich ein wechselstromartiger Antrieb in ein lateral oszillierendes Potential transformieren läßt (siehe Abschnitte 2.1.4, Seite 21 ff., und 2.2.5, Seite 57 ff.). Die Darstellung mittels eines lateral oszillierenden Potentials läßt die Verwendung der Methoden der Streutheorie zu.

Aufgrund der besonderen Form der Zeitabhängigkeit der hier betrachteten Potentiale sind im Vergleich zu den im letzten Kapitel behandelten Potentialen mit räumlich begrenztem Antrieb neue Effekte zu erwarten: Im Rahmen der klassischen Beschreibung kann ein an einem lateral oszillierenden Potential gestreutes Teilchen innerhalb des Wechselwirkungsbereichs von dem sich bewegendes Potential "eingeholt" werden und auf diese Weise mehrmals mit dem Potential wechselwirken. Dieser Mechanismus kann eine *komplexe Dynamik* des betrachteten Systems zur Folge haben.<sup>1</sup> Im Rahmen der quantenmechanischen Beschreibung besitzen lateral oszillierende Potentiale die besondere Eigenschaft, daß sowohl im adiabatischen Grenzfall (kleine Antriebsfrequenzen) als auch im diabatischen Grenzfall (hohe Antriebsfrequenzen) wohldefinierte effektive Potentiale vorhanden sind (siehe Abschnitt 2.2.2,

---

<sup>1</sup>Es handelt sich dabei jedoch nicht um den einzig möglichen Mechanismus, der zu chaotischem Verhalten in eindimensionalen zeitperiodischen Streusystemen führen kann. So wurden im vertikal oszillierenden  $1/\cosh^2$ -Potential, das in Abschnitt 3.2.1 behandelt wurde, chaotische Bereiche im Phasenraum gefunden.

Seite 43 ff., für die entsprechenden Definitionen). Im adiabatischen Grenzfall ist das effektive Potential durch das instantane Potential gegeben. Dieses hat im Falle lateral oszillierender Potentiale stets die gleiche Form und ist somit wohldefiniert. Im diabatischen Grenzfall ist das effektive Potential durch das zeitliche Mittel des zeitperiodischen Potentials gegeben. Die Form des zeitgemittelten Potentials kann sich für geeignet gewählte Parameter deutlich von der des instantanen Potentials unterscheiden. So kann das zeitliche Mittel einer lateral oszillierenden Potentialmulde (Barriere) eine Doppelmuldenform (Doppelbarrierenform) haben [73, 74, 126–128]. Folglich sind in Abhängigkeit der Frequenz verschiedene Effekte der sich unter Umständen deutlich unterscheidenden effektiven Potentiale zu erwarten.

Im folgenden werden zwei Anwendungsbeispiele genauer untersucht: Die Streuung an einem wechselstromgetriebenen Rechtecktopf wird sowohl klassisch als auch quantenmechanisch detailliert untersucht. Im Anschluß daran wird die Streuung an einem wechselstromgetriebenen Quantendot quantenmechanisch behandelt.

## 4.1 Wechselstromgetriebener Rechtecktopf

In Abschnitt 2.1.4, Seite 21 ff., sowie in Abschnitt 2.2.5, Seite 57 ff. wurde gezeigt, wie sich ein wechselstromartiger Antrieb in eine laterale Oszillation des Potentials transformieren läßt. Im folgenden wird die Streuung an einem lateral oszillierenden Rechteckpotential,

$$V(x, t) = V\theta(L - |x - \lambda \cos(\omega t)|), \quad (4.1)$$

betrachtet. Es handelt sich um einen Rechtecktopf der Tiefe  $|V|$  und der Breite  $2L$ , der mit der Amplitude  $\lambda$  lateral oszilliert. Wie schon bei der Behandlung von Systemen mit lokalem Antrieb ist auch hier der Fall anziehender Potentiale von Interesse. Eine Skizze dieses Potentialtyps kann in Abbildung 2.1, Seite 22, gefunden werden.

### 4.1.1 Klassische Beschreibung der Streuung am wechselstromgetriebenen Rechtecktopf

In Abschnitt 2.1.3, Seite 20 ff., wurde gezeigt, daß zur vollständigen Beschreibung eines Potentials der Form  $V_0(x) \cdot f_0(x/L)$  im Wechselstrombild

eine Behandlung des in den dimensionslosen Größen (2.5), Seite 19, definierten, reduzierten Problems genügt. Somit kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Streuung eines Teilchens der Masse 1 am Potential

$$V(\tilde{x}, \tau) = \tilde{V} \theta(1 - |\tilde{x} - \tilde{\lambda} \cos \tau|) \quad (4.2)$$

betrachtet werden. Die beiden freien Parameter des Systems sind in dieser Darstellung die Tiefe  $\tilde{V}$  des Topfes und die Amplitude  $\tilde{\lambda}$  der lateralen Oszillation.

Die Dynamik eines am lateral oszillierenden Rechtecktopf gestreuten Teilchens ist, ebenso wie im Falle des Rechtecktopfes mit oszillierendem Boden, komplett durch eine diskrete Abbildung bestimmt. Der Gradient des Potentials – und damit die auf das Teilchen wirkende Kraft – verschwindet für alle  $\tilde{x}$  außer an den Unstetigkeiten des Potentials an den Stellen  $\tilde{x} = \pm 1 + \tilde{\lambda} \cos \tau$ . An den Unstetigkeiten des Potentials sieht das Teilchen einen Potentialsprung, dessen Höhe von der momentanen Relativgeschwindigkeit des Teilchens in Bezug auf die Wand des Rechtecktopfes abhängt. Aufgrund der lateralen Bewegung des Potentials ist es möglich, daß das Teilchen mehrmals nacheinander an derselben Wand des Rechtecktopfes gestreut wird. Der Wechselwirkungsbereich, außerhalb dessen sich das Teilchen frei bewegt, ist in diesem Fall durch  $-1 - \tilde{\lambda} < \tilde{x} < 1 + \tilde{\lambda}$  gegeben.

Die Bewegungsgleichungen – mitsamt ihrer Herleitung – für die Streuung eines Teilchens am Potential (4.2) sind in Anhang F zu finden.

Zur Erstellung stroboskopischer Phasenraumabbildungen sowie zur Berechnung der Ablenkfunktion und der Verteilung der Aufenthaltszeiten werden die Bewegungsgleichungen (F.1)–(F.10), siehe Anhang F, Seite 152 ff., numerisch iteriert. Bevor jedoch die dabei erhaltenen Ergebnisse im einzelnen vorgestellt werden, soll noch einmal auf die äquivalente Darstellung als statisches Rechtecktopfpotential in Anwesenheit eines räumlich homogenen elektrischen Wechselfeldes eingegangen werden. Im Rahmen der Behandlung des klassischen Analogons der Kramers-Henneberger-Transformation in Abschnitt 2.1.4 wurde gezeigt, daß für ein Teilchen der Ladung  $q$ , das sich in einem elektrischen Wechselfeld der Frequenz  $\omega$  und der Amplitude  $E$  bewegt, die Amplitude der lateralen Oszillation des Potentials durch  $\lambda = (qE)/(\omega^2)$  (siehe Tabelle 2.1, Seite 25) gegeben ist. Die Tiefe des Rechtecktopfes ändert sich bei der Kramers-Henneberger-artigen Transformation nicht. Kombiniert mit der hier gewählten Darstellung in dimensionslosen Größen, ergeben sich

die beiden freien Parameter in den Bewegungsgleichungen (F.1)-(F.10) zu,

$$\tilde{V} = \frac{V}{mL^2\omega^2}, \quad \tilde{\lambda} = \frac{qE}{mL\omega^2}. \quad (4.3)$$

Im folgenden werden drei verschiedene Parameterbereiche untersucht:

1. *moderater Antrieb*: schwache elektrische Feldstärken  $E$  bei mittleren Frequenzen  $\omega$  bzw. große  $|\tilde{V}|$  und kleine  $\tilde{\lambda}$ ,
2. *starker Antrieb*: große Feldstärken  $E$  bei höheren, aber noch moderaten Frequenzen  $\omega$  bzw. kleine  $|\tilde{V}|$  und große  $\tilde{\lambda}$ ,
3. *diabatischer Limes*: extrem große Feldstärken  $E$  bei hohen Frequenzen  $\omega$  bzw. sehr kleine  $|\tilde{V}|$  und große  $\tilde{\lambda}$ .

Beim letzten Fall handelt es sich um den diabatischen Limes ( $\omega \rightarrow \infty$ ) im Bild des lateral oszillierenden Rechtecktopfes. Der diabatische Limes ist dabei so zu verstehen, daß im durch Gleichung (4.1) beschriebenen, dimensionsbehafteten, lateral oszillierenden Rechtecktopf der Limes  $\omega \rightarrow \infty$  bei konstantem  $\lambda = \tilde{\lambda}L$  betrachtet wird.

#### 1. Moderater Antrieb:

Für den Fall eines moderat getriebenen, lateral oszillierenden Rechtecktopfes wurden  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$  gewählt. Im Bild des wechselstromgetriebenen Rechtecktopfes ist in diesem Fall die Frequenz  $\omega$  moderat, so daß die Tiefe  $\tilde{V}$  des äquivalenten, lateral oszillierenden Topfes noch recht groß ist ( $\tilde{V} \propto \omega^{-2}$ , vgl. Gleichung (4.3)), und die Feldstärke  $E$  ist klein, so daß die Amplitude  $\tilde{\lambda}$  der lateralen Oszillation ebenfalls klein ist ( $\tilde{\lambda} \propto E/\omega^2$ ). Abbildung 4.1 zeigt eine stroboskopische Phasenraumabbildung. Dargestellt sind mehrere Tausend Streubahnen, die Separatrix, die den für Streubahnen unzugänglichen Bereich begrenzt, und Trajektorien im Topf gefangener Teilchen. Letztere starten an der linken Wand innerhalb des Rechtecktopfes mit Anfangsimpulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 0.01$  und 1.2, wenn sich dieser am linken Umkehrpunkt der lateralen Oszillation befindet. Die stroboskopische Aufnahme wird immer dann gemacht, wenn der Topf mit maximaler, positiver Geschwindigkeit den Ort  $\tilde{x} = 0$  nach rechts laufend passiert, so daß sich der Topf im Moment der Aufnahme im Bereich  $-1 < \tilde{x} < 1$  befindet. Der von den im Topf gefangenen Trajektorien ausgefüllte Bereich des Phasenraums besteht aus einem großen chaotischen Bereich, in den eine größere Stabilitätsinsel in der Nachbarschaft eines periodischen Orbits der Periode  $2\pi$

sowie mehrere Ketten kleinerer Inseln eingebettet sind, und einem regulären Bereich in der Nähe der Separatrix. Ein Teilchen, das sich auf der periodischen Bahn der Periode  $2\pi$  bewegt, wird am linken Topfrand reflektiert, wenn sich der Topf am linken Umkehrpunkt seiner lateralen Oszillation befindet, und stößt auf den rechten Topfrand, wenn sich der Topf am rechten Umkehrpunkt befindet. Die Separatrix (breite Linien bei  $\tilde{p} \approx 1.2$  und  $\tilde{p} \approx -1$ ) trennt den Bereich gefangener Trajektorien von dem für Streubahnen zugänglichen Teil des Phasenraums. Die Dynamik der im Topf gefangenen Teilchen ist – für die entsprechenden Anfangsbedingungen – identisch mit der Dynamik in einem unendlich hohen, lateral oszillierenden Rechtecktopf (siehe z. B. [79]). Dieses gebundene, zeitperiodische System wurde auch von Birnir *et. al.* [129], Chism *et. al.* [130] und von Drossel und Prellberg [131] im Bild des wechselstromgetriebenen Topfes untersucht. Dabei wurden ähnliche Strukturen im Phasenraum gefunden. Die in Abbildung 4.1 dargestellten Streubahnen laufen von links in den Wechselwirkungsbereich  $-1.1 < \tilde{x} < 1.1$  ein. In diesem Teil des Phasenraums sind keine ausgedehnten chaotischen Bereiche erkennbar.

In Abbildung 4.2 ist die Ablenkfunktion für den Fall  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$  dargestellt. Berücksichtigt wurde eine große Anzahl Streubahnen mit einlaufenden Impulsen aus verschiedenen großen Intervallen. Alle dargestellten Trajektorien laufen in derselben Phasenlage der Oszillation des Rechtecktopfs in den Wechselwirkungsbereich ein. Die Selbstähnlichkeit der Ablenkfunktion ist deutlich sichtbar, was auf die Existenz chaotischer Bereiche auch in dem für Streubahnen zugänglichen Gebieten des Phasenraums schließen läßt, wenn auch der Anteil an Anfangsbedingungen, die auf allen Skalen zu stark oszillierenden, auslaufenden Impulsen führen, sehr klein ist.

Abbildung 4.3 zeigt die Verteilung der Aufenthaltszeiten für  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$ . Für große Aufenthaltszeiten  $\tau$  fällt die Verteilung  $P(\tau)$  algebraisch ab, was auf die Existenz regulärer Bereiche im für Streubahnen zugänglichen Teil des Phasenraums hindeutet.

Der gemischte Phasenraum, die selbstähnliche Ablenkfunktion und der algebraische Abfall der Aufenthaltszeitverteilung zeigen, daß es sich beim hier betrachteten Rechtecktopf mit moderatem Wechselstromantrieb um ein *nichthyperbolisches* System handelt.

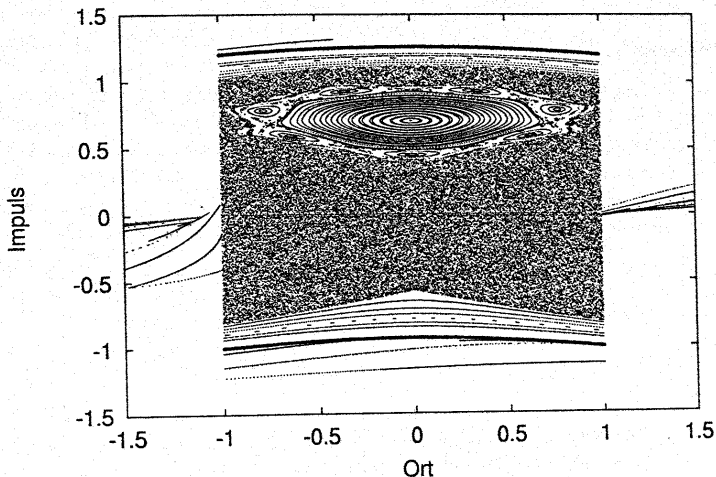


Abbildung 4.1: Stroboskopisches Phasenraumbild für den Fall  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$ . Dargestellt sind 75 im Topf gefangene Trajektorien mit Anfangsimpulsen zwischen  $\tilde{p}_0 = 0.01$  und 1.2, die diesen für Streubahnen unzugänglichen Bereich des Phasenraums begrenzende Separatrix (breite Linien bei  $\tilde{p} \approx 1.2$  und  $\tilde{p} \approx -1$ ) sowie 30000 Streubahnen mit Anfangsimpulsen aus einem kleinen Intervall. Weitere Erläuterungen im Text.

## 2. Starker Antrieb:

Für den Fall eines starken Antriebs wurden  $\tilde{V} = -0.04$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$  gewählt. Ausgehend vom gerade behandelten Fall eines moderat getriebenen Rechtecktopfs führen sowohl eine Verringerung von  $|\tilde{V}|$  als auch eine Erhöhung von  $\tilde{\lambda}$  zu einer Verkleinerung des für Streubahnen unzugänglichen, von im Topf gefangenen Bahnen ausgefüllten Bereichs im Phasenraum. Fällt die im vorangegangenen Fall beschriebene Separatrix in den chaotischen Bereich, so wird dieser große Bereich des Phasenraums "schlagartig" für Streubahnen zugänglich. Eine Erhöhung von  $\tilde{\lambda}$  führt außerdem zu einer Verkleinerung der Stabilitätsinsel in der Nachbarschaft des periodischen Orbits der Periode  $2\pi$

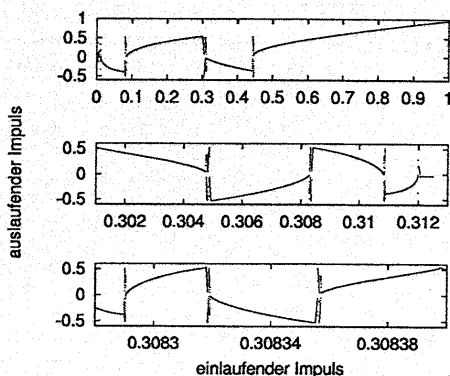


Abbildung 4.2: Selbstähnliche Ablenkfunktion für  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$ . Dargestellt sind jeweils  $10^5$  Streubahnen mit einlaufenden Impulsen aus verschieden großen Intervallen.

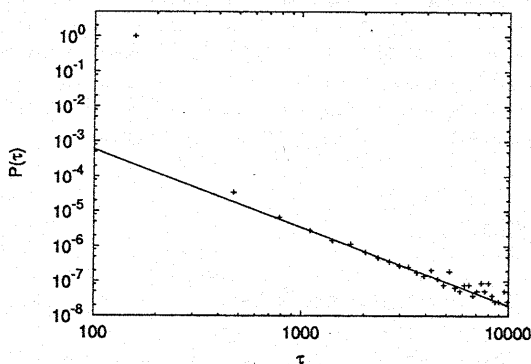


Abbildung 4.3: Algebraischer Abfall der Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$  für  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$ . Die durchgezogene Linie wird durch  $\text{const} \times \tau^{-\alpha}$  mit  $\alpha \approx 2.24$  beschrieben.



und läßt sie schließlich verschwinden (siehe auch [130]). Auf diese Weise verschwindet der für Streubahnen unzugängliche Bereich des Phasenraums. Für  $\tilde{V} = -0.04$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$  ist das bereits eingetreten, wie in Abbildung 4.4 leicht erkennbar ist. Im Bild des wechselstromgetriebenen Rechtecktopfes entsprechen diese Parameter einer im Vergleich zum vorangegangenen Fall leicht erhöhten Frequenz  $\omega$  und einer hohen Feldstärke  $E$ . Zur Erstellung der stroboskopischen Phasenraumabbildung (Abb. 4.4) sind nur von links einlaufende Streubahnen verwendet worden. Im Wechselwirkungsbereich  $-2.6 < \tilde{x} < 2.6$  ist ein großer chaotischer Bereich sichtbar, reguläre Bereiche lassen sich hingegen nicht erkennen.

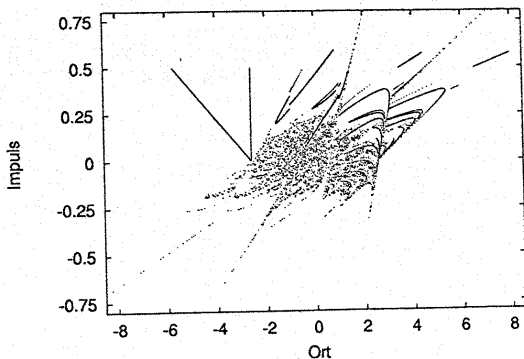


Abbildung 4.4: Stroboskopisches Phasenraumbild für den Fall  $\tilde{V} = -0.04$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Dargestellt sind 3000 von links einlaufende Streubahnen mit Anfangsimpulsen von  $10^{-3} \leq \tilde{p} \leq 0.5$ .

Abbildung 4.5 zeigt die Ablenkfunktion für den Fall  $\tilde{V} = -0.04$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Selbstähnliche Strukturen sind deutlich sichtbar und es kann auf die Existenz chaotischer Bereiche im Phasenraum geschlossen werden. Der Bruchteil der Anfangsbedingungen, die auf allen Skalen zu stark oszillierenden auslaufenden Impulsen führen, ist in diesem Fall viel größer als im vorher betrachteten Fall mit deutlich kleinerem  $\tilde{\lambda}$  und größerem  $|\tilde{V}|$ .

In Abbildung 4.6 ist die Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$  zu sehen. Sie fällt für große  $\tau$  exponentiell ab.

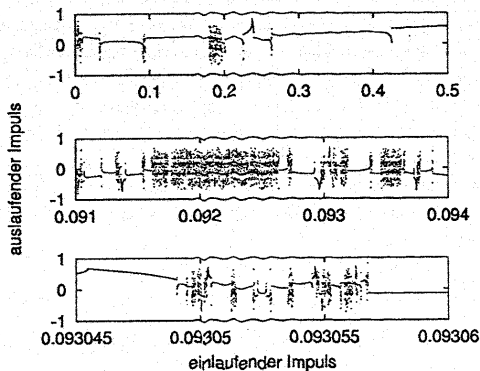


Abbildung 4.5: Selbstähnliche Ablenkfunktion für  $\tilde{V} = -0.04$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Dargestellt sind jeweils  $10^5$  Streubahnen mit einlaufenden Impulsen aus verschiedenen großen Intervallen.

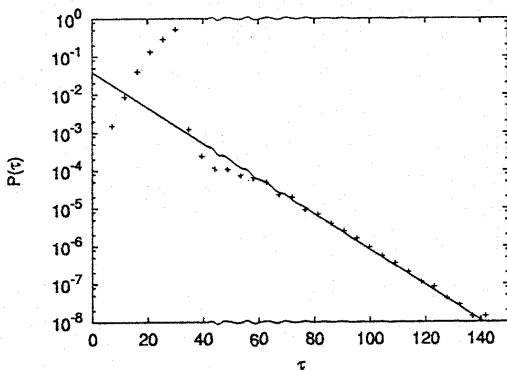


Abbildung 4.6: Exponentieller Abfall der Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$  für  $\tilde{V} = -0.04$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Die durchgezogene Linie wird durch  $\text{const} \times \exp(-\alpha\tau)$  mit  $\alpha \approx 0.11$  beschrieben.

Insgesamt zeigen der chaotische Phasenraum, die selbstähnliche Ablenkfunktion und der exponentielle Abfall der Aufenthaltszeitverteilung, daß der lateral oszillierende Rechtecktopf für diese Parameter (zumindest näherungsweise) ein *hyperbolisches* System darstellt.

### 3. *Diabatischer Limes:*

Es soll schließlich der diabatische Limes  $\omega \rightarrow \infty$  des durch das Potential (4.1) definierten, lateral oszillierenden Rechtecktopfes betrachtet werden. Für diesen Fall wurden  $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$  gewählt. In den hier verwendeten dimensionslosen Größen (siehe Gleichung (2.5)) ist dieser diabatische Limes mit dem Limes  $|\tilde{V}| \rightarrow 0$  bei konstantem  $\tilde{\lambda}$  gleichbedeutend. Im Bild des wechselstromgetriebenen Rechtecktopfs bedeutet dies den Fall sehr großer Frequenzen  $\omega$  und extrem hoher Feldstärken  $E$  (siehe Gleichung (4.3)). Im Falle der Streuung an einem sehr schnell lateral oszillierenden Potential ist zu erwarten, daß sich Effekte der Bewegung im zeitgemittelten Potential beobachten lassen. Im hier betrachteten Fall des lateral oszillierenden Rechtecktopfs ist das zeitgemittelte Potential durch

$$\begin{aligned} \bar{V}(\tilde{x}) = \tilde{V} \bigg\{ & \theta(1 + \tilde{\lambda} - |\tilde{x}|) \\ & - \frac{1}{\pi} \theta(\tilde{\lambda} - |1 + \tilde{x}|) \arccos\left(\frac{1 + \tilde{x}}{\tilde{\lambda}}\right) \\ & - \frac{1}{\pi} \theta(\tilde{\lambda} - |1 - \tilde{x}|) \arccos\left(\frac{1 - \tilde{x}}{\tilde{\lambda}}\right) \bigg\} \end{aligned} \quad (4.4)$$

gegeben, wie in Anhang D gezeigt wird. (Dieses Ergebnis wurde auch in den Referenzen [74] und [73] bei der quantenmechanischen Betrachtung einer lateral oszillierenden, rechteckförmigen Tunnelbarriere gefunden.) Das Potential  $\bar{V}(\tilde{x})$  ist in Abbildung 4.7 skizziert. Für  $\tilde{\lambda} > 1$  hat das zeitgemittelte Potential eine Doppelmuldenstruktur, da sich – anschaulich gesprochen – der lateral oszillierende Rechtecktopf aufgrund der harmonischen Oszillation länger an den Umkehrpunkten als am Ort  $\tilde{x} = 0$  seiner höchsten Geschwindigkeit aufhält.

Abbildung 4.8 zeigt ein stroboskopisches Bild des Phasenraums für den Fall  $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Es sind 1000 von links einlaufende Streubahnen dargestellt. Ein kleiner Bruchteil dieser Trajektorien verliert im Laufe vieler Kontakte mit den Unstetigkeiten des lateral oszillierenden Rechtecktopfs so viel Energie, daß sie für lange (aber endliche) Zeit im Wechselwirkungsbereich  $-2.6 < \tilde{x} < 2.6$  gefangen bleiben. Dabei werden im Laufe

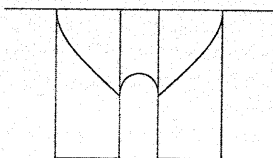


Abbildung 4.7: Das doppelmuldenförmige, zeitgemittelte Potential  $\bar{V}(\tilde{x})$  (durchgezogene Linie) sowie der lateral oszillierende Rechtecktopf in seinen beiden Umkehrpunkten (gestrichelte Linien) für  $\tilde{\lambda} > 1$ .

der Zeit Segmente von Kurven durchlaufen, die im Phasenraumportrait bei der Bewegung von im zeitgemittelten Potential  $\bar{V}(\tilde{x})$  gebundenen Teilchen durchlaufen werden. Die hier dargestellten Streutrajektorien des zeitabhängigen Problems können jedoch an den Sprungstellen  $\pm(\lambda - 1)$  der Ableitung  $d\bar{V}/d\tilde{x}$  in den Minima des zeitgemittelten Potentials von einem solchen Kurvensegment auf ein anderes springen. In der Bewegung im zeitgemittelten Potential gehören zwei verschiedene, solche Segmente zu verschiedenen (negativen) Gesamtenergien. Aus diesem Grunde sind in Abbildung 4.8 viele nichtgeschlossene Kurven zu sehen, die nur aus einzelnen Segmenten der zur Bewegung im zeitgemittelten Potential gehörenden, geschlossenen Kurven bestehen. Die in Abbildung 4.8 sichtbaren Strukturen des Phasenraums haben also *nicht* die Topologie eines Torus. Im Falle des (zeitunabhängigen) zeitgemittelten Potentials ist dieser Bereich des Phasenraums für Streubahnen im übrigen aufgrund der Energieerhaltung unzugänglich. Im hier untersuchten diabatischen Limes des zeitabhängigen Systems ist die Energie der gestreuten Teilchen keine Erhaltungsgröße, die sich ergebenden Strukturen im Phasenraum werden aber schon vom zeitgemittelten Potential dominiert. Chaotische Bereiche im Phasenraum sind nicht zu erkennen.

In Abbildung 4.9 ist die Ablenkfunktion für den Fall  $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$  dargestellt. Selbstähnliche Strukturen sind nicht sichtbar.

Abbildung 4.10 zeigt schließlich die Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$  für  $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Für große Aufenthaltszeiten  $\tau$  fällt  $P(\tau)$  algebraisch ab.

Das Fehlen chaotischer Bereiche im Phasenraum und selbstähnlicher Strukturen in der Ablenkfunktion, der algebraische Abfall der Aufenthalts-

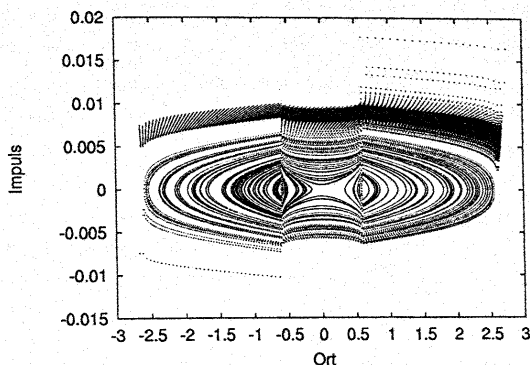


Abbildung 4.8: Stroboskopisches Phasenraumbild für den Fall  $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Dargestellt sind 1000 von links einlaufende Streubahnen mit Anfangsimpulsen von  $5 \cdot 10^{-3} \leq \tilde{p} \leq 7.5 \cdot 10^{-3}$ .

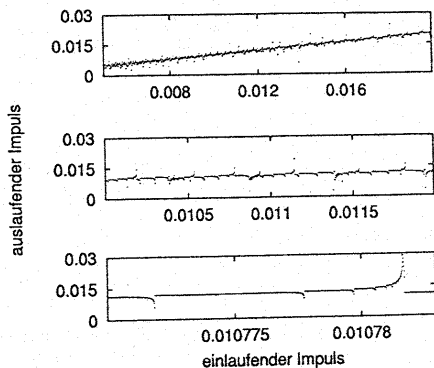


Abbildung 4.9: Ablenkfunktion für  $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Dargestellt sind jeweils  $10^3$  Streubahnen mit einlaufenden Impulsen aus verschiedenen großen Intervallen.

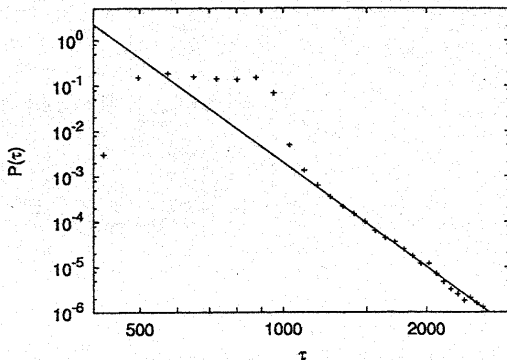


Abbildung 4.10: Algebraischer Abfall der Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$  für  $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$ . Die durchgezogene Linie wird durch  $\text{const} \times \tau^{-\alpha}$  mit  $\alpha \approx 7.64$  beschrieben.

zeitverteilung und die nicht-torusartige Topologie der Strukturen im Phasenraum deuten darauf hin, daß sich der lateral oszillierende Rechtecktopf im hier betrachteten diabatischen Limes wie ein *pseudointegrables System* verhält.

Insgesamt läßt sich zur Bewegung eines geladenen Massenpunktes in einem Rechteckpotential in Anwesenheit eines räumlich homogenen elektrischen Wechselfeldes festhalten, daß sich in diesem einfachen Modellsystem – je nach Wahl der Parameter – die verschiedensten Aspekte nichtlinearer Dynamik studieren lassen. Für große Antriebsfrequenzen und sehr große Feldstärken, also im Falle eines sehr starken Antriebs, wird das System von einem *effektiven Potential*, das sich durch Zeitmittelung erhalten läßt, dominiert. Dieses effektive Potential kann eine Doppelmuldenform haben und ist auch für die quantenmechanische Behandlung von großer Bedeutung.

### 4.1.2 Quantenmechanische Beschreibung der Streuung am wechselstromgetriebenen Rechtecktopf

Schließlich soll die Streuung am durch Gleichung (4.1), Seite 97, definierten lateral oszillierenden Rechteckpotential quantenmechanisch untersucht werden. Auch hier kommt die in Abschnitt 2.2.6, Seite 60 ff., beschriebene Methode zum Einsatz. In der Umsetzung der  $(t, t')$ -Methode (siehe Abschnitt 2.2.4, Seite 51 ff.) wird dem wechselstromartigem Antrieb durch die Anwendung der in Abschnitt 2.2.6 bei der Beschreibung von Systemen diesen Typs, siehe Seite 63, schon allgemein vorgestellten Vorgehensweise Rechnung getragen. Insbesondere kommt also die Kramers-Henneberger-Transformation zum Einsatz. Wie schon in der Behandlung der vorherigen Anwendungsbeispiele werden die in Abschnitt 2.2.3, Seite 46 ff., definierten totalen und partiellen Transmissionen und Reflexionen sowie die effektive Aufenthaltszeit berechnet (siehe Gleichungen (2.70), (2.77), (2.78) und (2.80) auf den Seiten 48-50).

Im folgenden werden verschiedene Aspekte der quantenmechanischen Beschreibung der Streuung am lateral oszillierenden Rechtecktopf untersucht: der adiabatische bzw. diabatische Grenzfall in Abhängigkeit der Frequenz, das dynamische Tunneln im diabatischen Grenzfall im Falle eines starken Antriebs und eventuelle Spuren der klassischen Dynamik in der quantenmechanischen Behandlung.

#### Adiabatischer und diabatischer Grenzfall

In Abschnitt 2.2.3, Seite 46 ff., wurde gezeigt, daß für ausreichend große Frequenzen  $\omega$  des zeitperiodischen Potentials Resonanzen bei Energien, die ein ganzzahliges Vielfaches von  $\hbar\omega$  oberhalb der Energien der gebundenen Zustände des zeitgemittelten Potentials liegen, zu erwarten sind. Diese Erwartung konnte bei der Untersuchung der Anwendungsbeispiele mit lokal begrenztem Antrieb in Kapitel 3 bestätigt werden. Im diabatischen Grenzfall ist das effektive Potential durch das zeitgemittelte Potential gegeben und die Resonanzenergien des vollen, zeitabhängigen Potentials sind in guter Näherung durch  $E_{n,l}^{\text{dia}} = E_n + l\hbar\omega$  gegeben, wobei  $E_n$  die Energie des  $n$ -ten gebundenen Zustands des effektiven Potentials bezeichnet. Ferner wurde in Abschnitt 2.2.3 gezeigt, daß für ausreichend kleine Antriebsfrequenzen  $\omega$  ein analoger Mechanismus möglich ist, falls sich die Form des zeitabhängigen Potentials im Laufe einer Periode nicht oder nur sehr wenig ändert. Dieses ist für lateral oszillierende Potentiale der Fall, da sich hier nur die Position

des Potentials (langsam) ändert. Somit ist im adiabatischen Grenzfall das effektive Potential durch das instantane Potential gegeben, und es sind Resonanzen bei Energien  $E_{n,l}^{\text{ad}} = E_n + \hbar\omega$  zu erwarten, wobei  $E_n$  in diesem Fall die Energie des  $n$ -ten gebundenen Zustands des instantanen Potentials ist.

Resonanzen in der Streuung am lateral oszillierenden Rechtecktopf wurden auch in Referenz [65] beobachtet. Dabei wurde zur Berechnung der Transmission bzw. Reflexion die Transfermatrixmethode verwendet, die nur im Falle stückweise konstanter Potentiale anwendbar ist.

Im Falle des lateral oszillierenden Rechteckpotentials (4.1) ist das instantane Potential natürlich rechteckförmig mit der Tiefe  $|V|$  und der Gesamtbreite  $2L$ . Das zeitgemittelte Potential ist durch Gleichung (D.11), Seite 147, gegeben. Aufgrund ihrer unterschiedlichen Formen besitzen beide Potentiale gebundene Zustände bei verschiedenen Energien. Die Energien der gebundenen Zustände des zeitgemittelten Potentials können numerisch berechnet werden.

Abbildung 4.11 zeigt die effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens für den Fall  $V = -1$ ,  $L = 2.5$  und  $\lambda = 1.0$  für verschiedene Frequenzen  $\omega$ . Die Masse des Teilchens ist  $m = 1$  und es wurde  $\hbar = 1$  gesetzt. Für die kleinste betrachtete Frequenz  $\omega = 0.1$  liegt der am deutlichsten sichtbare Resonanzpeak bei einer der Energien  $E_{n,l}^{\text{ad}}$ , während die Resonanzen im Falle der höchsten betrachteten Frequenz  $\omega = 1$  bei Energien  $E_{n,l}^{\text{dia}}$  liegen. Für Frequenzen, die zwischen diesen beiden Werten liegen, ist die Vorhersage der Lage der Resonanzpeaks mittels der modellhaften Beschreibung mit Hilfe eines effektiven Potentials nicht immer möglich.<sup>2</sup>

Die kinetische Energie eines im (lateral oszillierenden) Rechtecktopf gefangenen Teilchens kann bestenfalls  $p^2/(2m) = |V|$  betragen. Klassisch benötigt ein solches Teilchen die Zeit  $\tau_{\text{kl}} = 4mL/p$ , um von einer Wand des Topfs zur nächsten und wieder zurück zu laufen. Für die obigen Parameter ist  $\tau_{\text{kl}} = 10/\sqrt{2} \approx 7.1$ . Die Periode des zeitabhängigen Potentials ist durch  $T = 2\pi/\omega$  gegeben, somit ist  $T(\omega = 0.1) = 10 \cdot 2\pi \approx 63 \gg \tau_{\text{kl}}$ , während für  $\omega = 1$  gilt  $T(\omega = 1) = 2\pi \approx 6.3 < \tau_{\text{kl}}$ , was in Einklang mit den mit Hilfe der Wellenpaketpropagationsmethode ermittelten Daten steht.

<sup>2</sup>Zu Testzwecken wurde die für einige Parameter mit der Wellenpaketpropagationsmethode berechnete totale Transmission mit den mit Hilfe der Transfermatrixmethode [69] berechneten Daten [132] verglichen. Ferner wurden die Resonanzenergien mit Daten [133] verglichen, die unter Benutzung der Methode der komplexen Rotation [95] berechnet wurden. In beiden Fällen wurde eine gute Übereinstimmung gefunden.



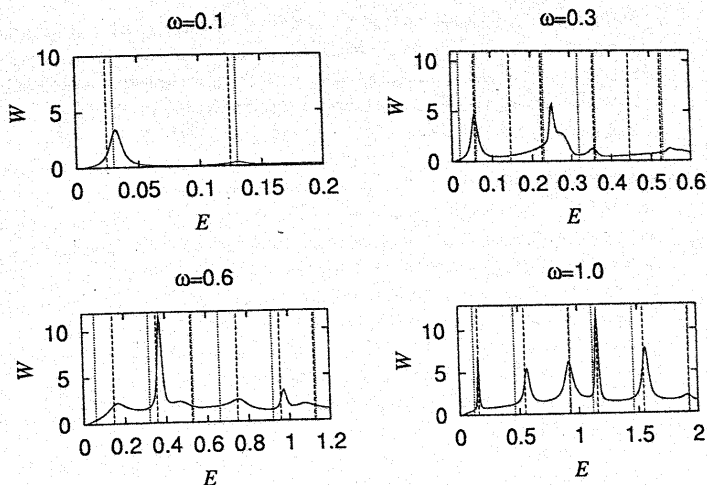


Abbildung 4.11: Effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens für verschiedene Frequenzen  $\omega$  für  $V = -1$ ,  $L = 2.5$ ,  $\lambda = 1$  und  $m = 1 = \hbar$ . Punktierte Linien: Energien  $E_{n,l}^{\text{ad}}$ , Gestrichelte Linien: Energien  $E_{n,l}^{\text{dia}}$ .

### Dynamisches Tunneln im diabatischen Grenzfall

Die Form des zeitgemittelten Potentials (D.11), Seite 147, hängt vom Verhältnis der Amplitude  $\lambda$  der lateralen Oszillation zur halben Topfbreite  $L$  ab. Ist  $\lambda < L$ , so hat das zeitgemittelte Potential eine "Ein-Mulden-Struktur" ohne lokale Maxima (für  $V < 0$ ). Ist hingegen  $\lambda > L$ , so ist das zeitgemittelte Potential doppelmuldenförmig, wie schon im letzten Abschnitt gezeigt wurde. Siehe insbesondere Abbildung 4.7, Seite 106, für die Doppelmuldenform und eine anschauliche Erklärung ihrer Entstehung.

In der quantenmechanischen Beschreibung eines eindimensionalen Systems mit einem doppelmuldenförmigen Potential kann es zur Ausbildung von *Tunneldoublets* kommen, also gebundenen Zuständen, deren Energien unterhalb des lokalen Maximums des Potentials liegen und deren Energie-

abstand deutlich kleiner ist als der mittlere Niveauabstand. Im diabatischen Grenzfall sollten solche Tunneldubletts in der Streuung am lateral oszillierenden Rechteckpotential für geeignet gewählte Parameter beobachtbar sein.

In Abbildung 4.12 ist die effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens für den Fall  $V = -1$ ,  $L = 5$  und  $\omega = 1$  für verschiedene  $\lambda$  zu sehen. Die Masse des Teilchens ist wiederum  $m = 1$  und es wurde  $\hbar = 1$  gesetzt. Somit ist  $\tau_{kl} \approx 14.2 > T(\omega = 1) = 2\pi \approx 6.3$  größer als die Periode  $T$  des Potentials und der diabatische Bereich ist erreicht. Für  $\lambda = 7.6, 8.0$  und  $8.2$  sind jeweils zwei Resonanzpeaks bei den durch  $E_{n=1,2,l=1}^{\text{dia}}$  gegebenen Energien sichtbar. Für  $\lambda = 8.4$  ist nur noch ein Resonanzpeak sichtbar. Dieser Effekt kann im Prinzip mehrere Ursachen haben: Entweder ist der Abstand zwischen den Energien des Dubletts zu klein geworden (kleiner als die Summe der "einzelnen Resonanzbreiten" bzw. kleiner als die Energieunschärfe der verwendeten Wellenpakete, was in diesem Fall zutrifft) oder eine Resonanz bei  $E_{n=1,l=1}^{\text{dia}}$  wird durch nichtlineare Effekte in  $\lambda$  unterdrückt.

Für den Fall  $V = -1$ ,  $L = 5$ ,  $\lambda = 8$  und  $\omega = 1$  sind in Abbildung 4.13 das doppelmuldenförmige effektive Potential mit den Energien seiner gebundenen Zustände, die totale Transmission  $T_{\text{tot}}$  und die Kanäle  $T_0$  sowie  $T_1$  der partiellen Transmission der Streuung am zeitabhängigen Potential als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens zu sehen. In den in der klassischen Beschreibung der Streuung verwendeten dimensionslosen Einheiten (siehe Gleichung (2.5), Seite 19, und Gleichung (4.2), Seite 98, für die Definition des Potentials) entsprechen diese Parameter dem Fall eines stark getriebenen Systems, der im letzten Abschnitt als zweiter Fall behandelt wurde (Seite 101 ff.). Die beiden untersten Energieniveaus liegen *unterhalb* des lokalen Maximums des effektiven Potentials und bilden *das betrachtete Tunneldublett*. Die Resonanzen der Streuung am lateral oszillierenden Rechteckpotential sind sowohl in der totalen als auch im elastischen Kanal der Transmission als Minima sichtbar. Der Kanal  $T_1$  der Transmission liefert, so wie die weiteren inelastischen Kanäle der Transmission, für diese Parameter nur einen kleinen Beitrag zur totalen Transmission.

Zur detaillierteren Untersuchung des gefundenen Tunnelphänomens wurde der Überlapp eines mit einer Energie zwischen  $E_{n=1,l=1}^{\text{dia}}$  und  $E_{n=2,l=1}^{\text{dia}}$  einlaufenden Wellenpakets mit der rechten (bzw. linken) Hälfte des Wechselwirkungsbereichs  $0 \leq x \leq L + \lambda$  (bzw.  $-(L + \lambda) \leq x \leq 0$ ) während der zeitlichen Entwicklung (stroboskopisch nach jeweils ganzzahligen Vielfachen der Periode  $T = 2\pi$  des Potentials) berechnet und in Abbildung 4.14 aufgetragen.

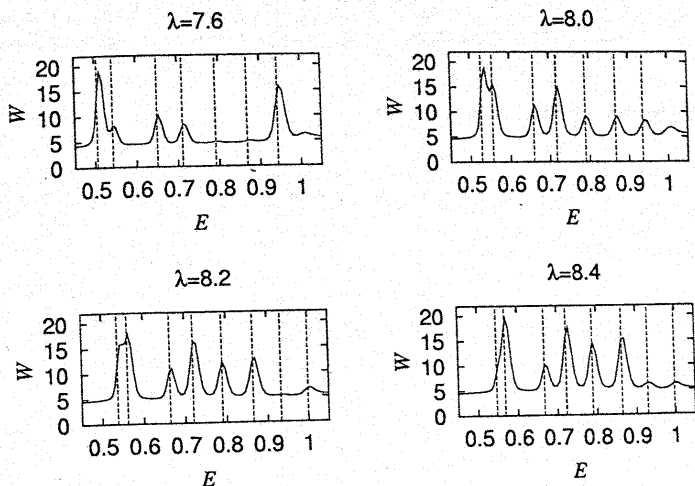


Abbildung 4.12: Effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens für verschiedene Amplituden  $\lambda$  für  $V = -1$ ,  $L = 5$ ,  $\omega = 1$  und  $m = 1 = \hbar$ . Gestrichelte Linien: Energien  $E_{n,l=1}^{\text{dia}}$ .

Neben dem für eine Resonanz typischen Abfall des Überlapps  $U$  im Laufe der Zeit  $t$  sind kohärente Oszillationen im Überlapp mit der rechten (bzw. linken) Hälfte des Wechselwirkungsbereichs deutlich sichtbar. Der im Wechselwirkungsbereich verbleibende Teil des Wellenpakets schwingt also zwischen den beiden Mulden des effektiven Potentials hin und her, wobei das lokale Maximum des effektiven Potentials durchtunnelt werden muß. Aus Abbildung 4.14 läßt sich die Periode dieser Oszillation zu  $T_{ac}^{\text{tu}} \approx 42 \cdot 2\pi$  bestimmen. Dieser Wert stimmt näherungsweise mit dem im doppelmuldenförmigen effektiven Potential zu erwartenden Wert von  $T_{\text{eff}}^{\text{tu}} = 2\pi\hbar/(\Delta E) \approx 36 \cdot 2\pi$  überein, wobei  $\Delta E$  die Energiedifferenz der Niveaus des Tunneldubletts ist.

Im Rahmen der Beschreibung mit Hilfe des effektiven Potentials läßt sich der in der Streuung beobachtete Tunnelprozeß wie folgt erklären: Aufgrund der periodischen Zeitabhängigkeit des vollen, lateral oszillierenden Potenti-

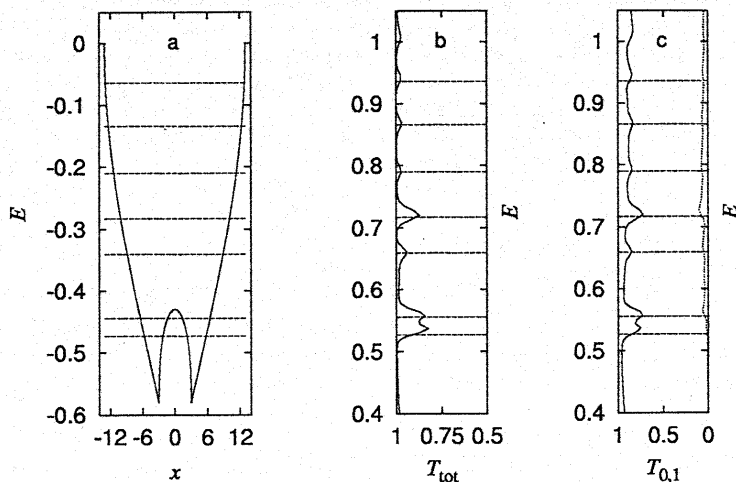


Abbildung 4.13: (a): Effektives Potential (durchgezogene Linie) als Funktion des Ortes  $x$  mit den Energien der gebundenen Zustände (gestrichelte Linien). (b): Totale Transmission  $T_{\text{tot}}$  (durchgezogene Linie, auf der Abszisse abgetragen) als Funktion der Energie  $E$  des einlaufenden Teilchens (auf der Ordinate abgetragen) sowie die Energien  $E_{n,l=1}^{\text{dia}}$  (gestrichelt). (c): Partielle Transmissionskanäle  $T_0$  (durchgezogene Linie) und  $T_1$  (punktirierte Linie) als Funktion von  $E$  und die Energien  $E_{n,l=1}^{\text{dia}}$  (gestrichelt).

als kann das einlaufende Wellenpaket die Energie eines Photons abgeben. In diesem Fall "entsteht" dann ein Wellenpaket, dessen Energie zwischen den Energien des Tunneldubletts des effektiven Potentials liegt. Dieses Wellenpaket ist im wesentlichen durch eine Superposition der beiden Eigenfunktionen zu den Energien des Tunneldubletts gegeben und kann zwischen den beiden Mulden des effektiven Potentials "hin- und herlaufen", wie im folgenden noch erläutert wird.

Die obige Abschätzung von  $T_{\text{eff}}^{\text{tu}}$  lässt sich wie folgt motivieren: Beschreibt man das Tunneldublett als (abgeschlossenes) Zwei-Niveau-System mit den

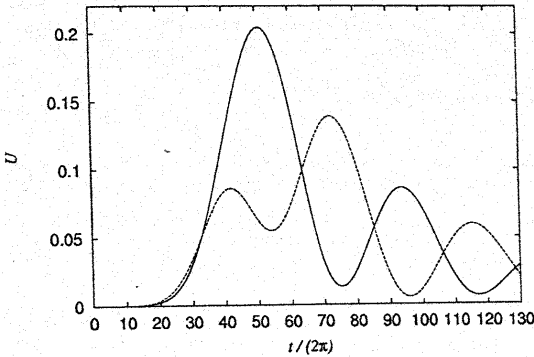


Abbildung 4.14: Überlapp  $U$  mit der rechten (durchgezogene Linie) bzw. der linken (gestrichelte Linie) Hälfte des Wechselwirkungsbereichs als Funktion der Zeit  $t$  für ein mit einer Energie zwischen  $E_{n=1,l=1}^{\text{dia}}$  und  $E_{n=2,l=1}^{\text{dia}}$  einlaufendes Wellenpaket im Verlauf des Streuprozesses.

(normierten) Zuständen  $|1\rangle$  und  $|2\rangle$  zu den Energien  $E_1 = 0$  und  $E_2 = \Delta E$ , so ist ein in einer der beiden Mulden "konzentrierter" Zustand durch

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle \pm |2\rangle)$$

gegeben. Die Zeitentwicklung dieses Zustandes ist somit

$$|\alpha(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle \pm e^{-i\Delta E t/\hbar} |2\rangle).$$

Der Überlapp von  $|\alpha(t)\rangle$  mit der Mulde, in der sich der betrachtete Zustand zum Zeitpunkt  $t = 0$  befand, ist

$$\begin{aligned} |\langle\alpha(t=0)|\alpha(t)\rangle|^2 &= \frac{1}{2} |\langle 1|1\rangle \pm 0 \pm 0 + e^{-i\Delta E t/\hbar} \langle 2|2\rangle|^2 \\ &= \frac{1}{2} \left( 1 + \cos\left(\frac{\Delta E t}{\hbar}\right) \right). \end{aligned}$$

Dieser Überlapp oszilliert mit der Periode

$$T_{\text{eff}}^{\text{tu}} := 2\pi \frac{\hbar}{\Delta E}.$$

Die physikalische Interpretation dieser Überlegungen lautet: Ein in der linken Mulde befindliches Wellenpaket durchtunnelt die Barriere des Potentials und befindet sich nach der Zeit  $t = T_{\text{eff}}^{\text{tu}}/2$  in der rechten Potentialmulde. Insgesamt schwingt das betrachtete Wellenpaket zwischen den beiden Potentialmulden mit der Periode  $T_{\text{eff}}^{\text{tu}}$  hin und her.

Die in den Abbildungen 4.13 und 4.14 präsentierten Daten zeigen deutlich, daß sich das betrachtete System im diabatischen Bereich befindet und daher das effektive Potential durch das zeitgemittelte Potential gegeben ist. Das gilt insbesondere auch für das in Abbildung 4.14 dargestellte tunnelnde Wellenpaket, da die Periode  $T_{\text{eff}}^{\text{tu}}$  der Tunneloszillation deutlich größer ist als die Periode des lateral oszillierenden Potentials.

In der Streuung am zeitabhängigen, lateral oszillierenden Rechteckpotential konnte das im zeitgemittelten Potential vorhandene Tunneldoublett eindeutig detektiert werden. Das dabei gefundene Tunneln eines in Resonanz gefangenen Wellenpakets kann im folgenden Sinne als *dynamisches Tunneln* bezeichnet werden: Im Bild des lateral oszillierenden Potentials kommt die Tunnelbarriere bzw. das lokale Maximum des effektiven Potentials durch die effektive Zeitmittelung des Potentials zustande. Es ist jedoch zu beachten, daß in der klassischen Beschreibung des Systems für die hier verwendeten Parameter noch keine Barriere im Phasenraum gefunden wurde. Die in den hier vorgestellten quantenmechanischen Rechnungen verwendeten Parameter entsprechen dem im Rahmen der klassischen Beschreibung der Streuung an zweiter Stelle untersuchten Fall eines stark getriebenen Systems, Seite 101 ff. Für diesen Fall konnte die klassische Dynamik als hyperbolisch klassifiziert werden, wobei eine (dynamische) Barriere im Phasenraum nicht festgestellt wurde. Effekte des zeitgemittelten Potentials konnten im Rahmen der klassischen Behandlung erst für deutlich stärker getriebene Systeme festgestellt werden. Sie wurden im (klassischen) diabatischen Limes, der im letzten Abschnitt an dritter Stelle betrachtet wurde (siehe Seite 105 ff.), gefunden. Die hier benutzte Definition des Begriffs "dynamisches Tunneln" unterscheidet sich also etwas von der üblichen Definition [134], da die zu durchtunnelnde Barriere im effektiven Potential vorhanden ist. Die "effektive Zeitmittelung" und damit das "Auftauchen" des zeitgemittelten Potentials kann jedoch als dynamischer Effekt angesehen werden.

Somit konnte an diesem Beispiel gezeigt werden, daß ein anziehendes Potential, das nur aus einer *einzigen* Mulde besteht, mit Hilfe eines ausreichend starken, wechselstromartigen Antriebs mit ausreichend hoher Frequenz wie ein *doppelmuldenförmiges Potential*, wie es für zweiatomige Moleküle typisch

ist, wirken kann.

Das Auftreten eines doppelmuldenförmigen, effektiven Potentials ist aus der Atomphysik bekannt: Betrachtet man ein Wasserstoffatom in einem starken Laserfeld, so lassen sich im Limes hoher Frequenzen die gebundenen Zustände als gebundene Zustände des zeitlichen Mittels des lateral oszillierenden Coulombpotentials beschreiben [126–128]. In diesem Limes ist das Atom trotz des äußeren Feldes *stabil* und die gebundenen Zustände haben keinen Überlapp mit den Streuzuständen. Der angesprochene Hochfrequenzlimes kann als die niedrigste Ordnung einer iterativen Lösung der in Floquetmoden geschriebenen, zeitabhängigen Schrödingergleichung angesehen werden. Eine Berücksichtigung höherer Ordnungen entspricht im wesentlichen einer Berücksichtigung von Termen höherer Ordnung in  $\omega^{-1}$  [127]. Im Gegensatz dazu sind die in den Abbildungen 4.13 und 4.14 vorgestellten Daten mit Hilfe der Wellenpaketpropagationsmethode berechnet worden, wodurch die Zeitabhängigkeit des Potentials in vollem Umfang berücksichtigt wurde. Der Hochfrequenzlimes aus [126–128] ist hier also nicht erreicht, da das Tunneldublett des effektiven Potentials offensichtlich an die Streuzustände koppelt. Somit ist der Hochfrequenzlimes aus [126–128] nicht dem im hier untersuchten Fall des lateral oszillierenden Rechtecktopfes erreichten, diabatischen Bereich äquivalent. Der Hochfrequenzlimes tritt erst bei noch höheren Frequenzen ein.<sup>3</sup> Desweiteren zeigen die Abbildungen 4.13 und 4.14, daß ein Beobachten des doppelmuldenförmigen, effektiven Potentials mit Hilfe eines Streuexperimentes prinzipiell direkt möglich ist, wobei das hier gewählte lateral oszillierende Rechteckpotential auf eine eventuelle experimentelle Realisierung in der mesoskopischen Physik zugeschnitten ist.

Die typische Flugzeit eines Elektrons durch ein (Ein-) muldenförmiges Potential von einer Größenordnung eines  $\mu\text{m}$  in einer Ga-As-Anordnung mit einer Elektronendichte von ca.  $n_s \approx 2 \cdot 10^{15} \text{m}^{-2}$  beträgt ungefähr  $10^{-11}$  Sekunden. Experimente zur Untersuchung des Photon-assisted-Tunneling konnten mit Frequenzen zwischen 100GHz und 200GHz durchgeführt werden [27]. Somit haben die Flugzeit und die Periode des Antriebs dieselbe Größenordnung, wodurch die in dieser Arbeit im Rahmen der quantenmechanischen Untersuchungen beschriebenen Effekte prinzipiell in mesoskopischen Systemen beobachtbar sein sollten. Die zur Erzeugung eines doppelmuldenförmigen ef-

<sup>3</sup>Eine Berücksichtigung der nächsten Ordnung in dem Ansatz aus [126] führt zu endlichen Ionisationswahrscheinlichkeiten [127] und damit zu einer Kopplung der Streuzustände an die gebundenen Zustände des zeitgemittelten Potentials, die für etwas niedrigere Frequenzen auch in der Streuung sichtbar werden.

fektiven Potentials nötige elektrische Feldstärke läßt sich aus der Beziehung  $\lambda = (qE)/(m\omega^2) \approx 1.5L$  abschätzen, wobei  $q$  in diesem Fall die Elementarladung,  $m$  die effektive Elektronenmasse und  $\omega$  die Frequenz des Wechselfeldes ist. Für  $L \approx 10^{-6} \text{ m}$ ,  $q = e$ ,  $m \approx m_e$  und  $\omega \approx 10^{11} \text{ s}^{-1}$  ist  $E \approx 10^4 \text{ V/m}$ .

Grossman *et. al.* untersuchten den Einfluß eines wechselstromartigen Antriebs auf ein doppelmuldenförmiges Potential [135]. Dabei handelt es sich um ein gebundenes eindimensionales System, in dem die untersten Eigenzustände bei abgeschaltetem Antrieb Tunneldoublets bilden. Durch eine geeignete Wahl der Frequenz und der Stärke des Wechselstromantriebs kann ein in einer der Potentialmulden präparierter Zustand dort "festgehalten" werden. Das Durchtunneln der Potentialbarriere kann also in kohärenter Weise unterdrückt werden. Während im Falle der Streuung am wechselstromgetriebenen Rechtecktopf der zeitperiodische Antrieb eine effektive Tunnelbarriere erzeugt, sind in Referenz [135] die Auswirkungen eines *zusätzlichen* Wechselstromantriebs auf ein System, in dem schon Tunneldoublets vorhanden sind, untersucht worden.

Ein Überblick der Behandlung zeitperiodischer Quantensysteme, wobei insbesondere Systeme betrachtet werden, in denen Tunneleffekte eine Rolle spielen, ist in einem kürzlich erschienen Review von Grifoni und Hänggi zu finden [1].

### Spuren der klassischen Dynamik in der quantenmechanischen Beschreibung der Streuung

Abschließend soll noch untersucht werden, ob sich Spuren der in der klassischen Behandlung der Streuung am lateral oszillierenden Rechteckpotential gefundenen verschiedenen Typen der klassischen Dynamik in der hier betrachteten quantisierten Form des Systems finden lassen. Zu diesem Zweck wird die *Husimidichte* der gestreuten Wellenpakete betrachtet.

Sei

$$\hat{a}^\dagger := \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\hat{x} - i\hat{p}) \quad (4.5)$$

der Erzeugungsoperator des eindimensionalen harmonischen Oszillators.  $\hat{x}$  und  $\hat{p}$  bezeichnen dabei den Orts- bzw. den Impulsoperator. Ein *kohärenter Zustand* ist als

$$|z\rangle := \exp(z\hat{a}^\dagger)|\chi_0\rangle \quad (4.6)$$

definiert, wobei  $|\chi_0\rangle$  den Grundzustand des harmonischen Oszillators, definiert als  $\hat{a}|\chi_0\rangle = 0$ , bezeichnet. In dieser Definition ist  $z = (x + ip)/\sqrt{2}$  und



$x$  und  $p$  sind die Orts- bzw. Impulskoordinaten des Phasenraums.  $|z\rangle$  ist ein Gaußsches Wellenpaket mit minimaler Unschärfe  $\Delta x = \sqrt{\hbar/2} = \Delta p$ . Die Husimidichte eines quantenmechanischen Zustands  $|\psi\rangle$  ist als

$$W_\psi(x, p) := \frac{|\langle z|\psi\rangle|^2}{2\pi\langle z|z\rangle} \quad (4.7)$$

definiert, wobei  $\langle z|z\rangle = \exp(zz^*)/\hbar$  gilt [79]. Mit dieser Definition ist  $W_\psi(x, p)$  die Wahrscheinlichkeit, den Zustand  $|\psi\rangle$  in einer Phasenraumzelle der Größe  $\Delta x \cdot \Delta p$ , die um den Phasenraumpunkt  $(x, p)$  zentriert ist, zu finden [79].

Im folgenden wird eine leicht abgewandelte Form der allgemein üblichen Definition verwendet. Es wird der Überlapp des quantenmechanischen Zustands  $|\psi\rangle$  mit einem am Ort  $(x, p)$  zentrierten Wellenpaket mit den Unschärfen  $\Delta p = \sigma\sqrt{\hbar/2}$  und  $\Delta x = \sqrt{\hbar/2}/\sigma$  berechnet. Damit wird dem stark "verzerrten" Verhältnis der Orts- und Impulsunschärfe der propagierten Wellenpakete – es werden immer Wellenpakete mit möglichst scharfem Impuls und deswegen großer Ortsunschärfe in der Wellenpaketpropagationsmethode verwendet – Rechnung getragen.

Um die im vorangegangenen Abschnitt vorgestellten stroboskopischen Phasenraumabbildungen mit der quantenmechanischen Streuung am lateralschwingenden Rechteckpotential vergleichen zu können, wird die *zeitintegrierte Husimidichte* untersucht. Diese ist als die Summe der nach den einzelnen diskreten Schritten (stroboskopisch nach immer einer Periode des Potentials) berechneten Husimidichten für das jeweilige, gestreute Wellenpaket definiert. Wird für die Energie des einlaufenden Pakets eine der schon ausführlich behandelten Resonanzenergien gewählt, so sind aufgrund der hohen effektiven Aufenthaltszeit charakteristische Strukturen in der zeitintegrierten Husimidichte im Wechselwirkungsbereich zu erwarten.<sup>4</sup> Im semiklassischen Limes  $\hbar \rightarrow 0$  sollten die aus der klassischen Dynamik bekannten Strukturen in der zeitintegrierten Husimidichte erscheinen.

Abbildung 4.15 zeigt die zeitintegrierte Husimidichte für den Fall  $V = -1$ ,  $L = 5$ ,  $\lambda = 8$  und  $\omega = 1$ , also für die Parameter, für die das dynamische Tunneln des gestreuten Wellenpakets detailliert untersucht wurde. Die Energie

<sup>4</sup>Für einige Parameter wurden die mit der Wellenpaketpropagationsmethode berechneten zeitintegrierten Husimidichten mit den Husimidichten der mit Hilfe der Methode der komplexen Rotation berechneten Resonanzfunktionen [133] verglichen. Dabei wurde gefunden, daß die Husimidichten im Wechselwirkungsbereich recht gut übereinstimmen, insbesondere in den Positionen der Extrema.

des einlaufenden Wellenpakets ist in diesem Fall  $E_{n=4,l=1}^{\text{dia}}$ . Eine Phasenraumzelle der Größe  $h = 2\pi\hbar$  ist ebenfalls eingezeichnet. In den in Abbildung 4.15 verwendeten, dimensionslosen Einheiten für Ort und Impuls (2.5), Seite 19, sind die Abmessungen der Phasenraumzelle durch  $L_{\bar{x}}L_{\bar{p}} = L_x L_p / (L^2 m \omega)$  gegeben, womit sich für  $L_x L_p = h$  in diesem Fall  $L_{\bar{x}}L_{\bar{p}} = 2\pi/25 \simeq 0.25$  ergibt. Der Konturplot zeigt deutlich das von links mit positivem Impuls einlaufende Wellenpaket, den elastischen Kanal der Transmission sowie den die Resonanz ausmachenden, großen gefangenen Teil des Wellenpakets innerhalb des Wechselwirkungsbereichs. Die doppelmuldenartige Form des effektiven Potentials ist an der Form des "direkt transmittierten" Teils des Wellenpakets für positive Impulse innerhalb des Wechselwirkungsbereichs ebenfalls deutlich sichtbar. Ferner sind der elastische Kanal der Reflexion und der Kanal  $T_1$  der Transmission erkennbar.

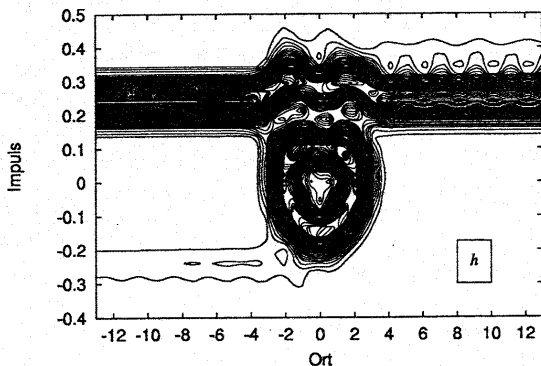


Abbildung 4.15: Konturplot der zeitintegrierten Husimidichte (mit  $\sigma = 10$ ) für die Parameter von Abbildung 4.13. Die Energie des einlaufenden Wellenpakets ist  $E_{n=4,l=1}^{\text{dia}}$ . Ort und Impuls in dimensionslosen Einheiten, siehe Gleichung (2.5), Seite 19. Eine Phasenraumzelle der Größe  $h$  ist ebenfalls eingezeichnet.

Das dem hier betrachteten quantenmechanischen System entsprechende klassische Analogon wurde bereits im letzten Abschnitt behandelt. In den im Rahmen der klassischen Beschreibung verwendeten dimensionslosen Ein-

heiten (siehe Gleichung (2.5), Seite 19) ist dieses System durch  $\tilde{V} = -0.04$  und  $\tilde{\lambda} = 1.6$  charakterisiert und entspricht dem Fall des stark getriebenen Rechtecktopfs (siehe Seite 101 ff.). Die mit Abbildung 4.15 zu vergleichende stroboskopische Phasenraumaufnahme ist in Abbildung 4.4 auf Seite 103 zu finden. Der die quantenmechanische Resonanz ausmachende, gefangene Teil des gestreuten Wellenpakets liegt im chaotischen Bereich der für lange, aber endliche Zeiten gefangenen Streubahnen im klassischen Phasenraum.

Abbildung 4.16 zeigt die zeitintegrierte Husimidichte für den Fall  $V = -3$ ,  $L = 5$ ,  $\lambda = 0.5$  und  $\omega = 0.4$ , wobei  $\hbar = 0.9$  gewählt wurde. Die Masse des Teilchens ist wiederum durch  $m = 1$  gegeben. Auch hier ist eine Phasenraumzelle der Größe  $h = 2\pi\hbar$  eingezeichnet. Als Energie des einlaufenden Wellenpakets wurde eine der Resonanzenergien gewählt, die aus den Daten der effektiven Aufenthaltzeit gewonnen wurden. Das einlaufende Wellenpaket, der elastische Kanal der Transmission sowie der der Reflexion sind deutlich sichtbar. Der die Resonanz ausmachende, gefangene Teil des gestreuten Wellenpakets ist im Wechselwirkungsbereich hauptsächlich auf zwei Bereiche mit Impulsen (in dimensionslosen Einheiten, siehe Gleichung (2.5), Seite 19) von  $0.75 \lesssim \tilde{p} \lesssim 1.5$  und  $-1.4 \lesssim \tilde{p} \lesssim -0.4$  konzentriert. Ein großer Teil des Wechselwirkungsbereichs ist für das gestreute Wellenpaket nicht zugänglich.

In den durch Gleichung (2.5) definierten, dimensionslosen Größen ausgedrückt, wird das in Abbildung 4.16 betrachtete System durch  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$  beschrieben und entspricht somit dem im letzten Abschnitt behandelten Fall des moderat getriebenen Rechtecktopfs (siehe Seite 99 ff.). Abbildung 4.16 ist mit einer stroboskopischen Phasenraumabbildung für klassische Streubahnen zu vergleichen. Aufgrund der großen Ortsunschärfe der in der Wellenpaketpropagationsmethode verwendeten Wellenpakete sollte Abbildung 4.16 jedoch mit einer stroboskopischen Phasenraumabbildung für einen zeitlich konstanten Fluß von einlaufenden klassischen Streubahnen verglichen werden. Abbildung 4.17 zeigt eine stroboskopische Phasenraumabbildung für von links einlaufende Streubahnen mit 100 verschiedenen einlaufenden Impulsen, die den Wechselwirkungsbereich zu jeweils 100 verschiedenen Phasenlagen des oszillierenden Potentials, gleichmäßig verteilt über das Intervall  $[0, 2\pi)$ , erreichen. Innerhalb des Wechselwirkungsbereichs  $-1 \leq \tilde{x} \leq 1$  ist der Bereich  $|\tilde{p}| \lesssim 0.9$  für Streubahnen unzugänglich, wie schon in der Untersuchung der klassischen Mechanik im letzten Abschnitt festgestellt wurde. Dieses Verhalten stimmt zumindest qualitativ mit der in Abbildung 4.16 gezeigten zeitintegrierten Husimidichte überein.

Sowohl im Falle des stark getriebenen Topfes als auch im Falle des mo-

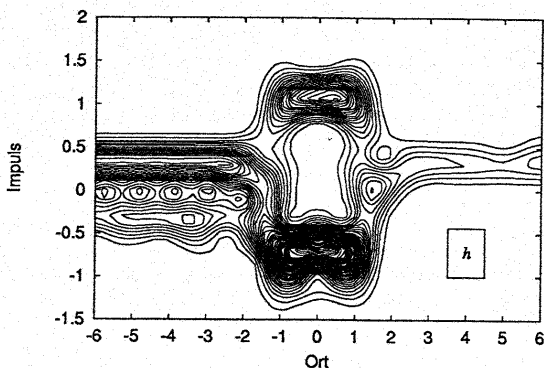


Abbildung 4.16: Konturplot der zeitintegrierten Husimidichte (mit  $\sigma = 10$ ) für  $V = -3$ ,  $L = 5$ ,  $\lambda = 0.5$ ,  $\omega = 0.4$ ,  $\hbar = 0.9$  und  $m = 1$ . Die Energie des einlaufenden Wellenpakets entspricht einer der Resonanzenergien aus der effektiven Aufenthaltzeit. Ort und Impuls in dimensionslosen Einheiten, siehe Gleichung (2.5), Seite 19. Eine Phasenraumzelle der Größe  $h$  ist ebenfalls eingezeichnet.

deraten Antriebs stimmen die Strukturen der klassischen, stroboskopischen Phasenraumabbildungen und der quantenmechanischen, zeitintegrierten Husimidichten innerhalb des Wechselwirkungsbereichs qualitativ überein. Diese Übereinstimmung beschränkt sich allerdings auf die Anordnung der Maxima in der Husimidichte und die Punktdichte im klassischen Phasenraum. Feinere Strukturen der klassischen Dynamik können nicht aufgelöst werden. Ein solche feinere Auflösung kann aber in den hier betrachteten quantenmechanischen Systemen nicht erwartet werden, da diese allesamt in einem "rein quantenmechanischen Parameterbereich" liegen: Die Anzahl der gebundenen Zustände im effektiven Potential liegt zwischen 1 und 10. Übertragen auf die in dimensionslosen Einheiten dargestellten, zeitintegrierten Husimidichten bedeutet dies, daß eine Phasenraumzelle mit der Größe  $h$  recht groß ist verglichen mit dem für die klassische Dynamik interessanten Teil des Phasenraums. In der Husimidichte können daher die Strukturen der klassischen Dynamik nur stark "verschmiert" vorkommen. Außerdem sind die in

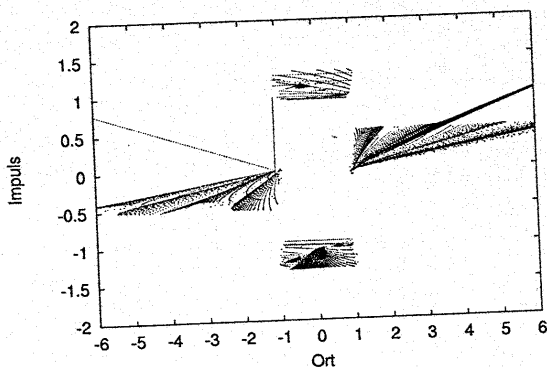


Abbildung 4.17: Stroboskopisches Phasenraumbild für  $\tilde{V} = -0.75$  und  $\tilde{\lambda} = 0.1$ . Dargestellt sind von links einlaufende Trajektorien mit 100 verschiedenen Impulsen im Bereich  $10^{-3} \leq \tilde{p}_0 \leq 1$ , die zu jeweils 100 verschiedenen Phasenlagen des oszillierenden Potentials (gleichmäßig über das Intervall  $[0, 2\pi)$  verteilt) in den Wechselwirkungsbereich gelangen.

der effektiven Aufenthaltszeit detektierten Resonanzen mit Hilfe eines rein quantenmechanischen Modells in zufriedenstellender Weise erklärbar.

## 4.2 Wechselstromgetriebener Quantendot

Es soll nun die Streuung an einem Potential, dessen Form durch eine typische Anwendung aus dem Gebiet der mesoskopischen Physik motiviert wird, untersucht werden. Dabei handelt es sich um einen Quantendot in einem räumlich homogenen elektrischen Wechselfeld. Die konkrete Form des Potentials läßt sich mit Hilfe eines eindimensionalen Schnitts "entlang der Transportrichtung" durch das betrachtete System motivieren. Im Rahmen dieser Beschreibung wird der Quantendot als eine Doppelbarriere mit einer zentralen Mulde dargestellt. Das den Quantendot beschreibende Potential wird als stückweise konstant angesetzt. Mit Hilfe der Kramers-Henneberger-Transformation wird der wechselstromartige Antrieb wiederum in ein lateral oszillierendes Potential transformiert (siehe Abschnitte 2.1.4, Seite 21 ff., so-

wie 2.2.5, Seite 57 ff.). Somit ist das zeitperiodische Streupotential durch

$$\begin{aligned} V(x, t) &= U([x - \lambda \cos(\omega t)]) \\ U(x) &= V_0 \theta(L_0 - |x|) + V_1 \theta(L_1 - |x|) \end{aligned} \quad (4.8)$$

gegeben. Das den Quantendot beschreibende Potential  $U(x)$  ist in Abbildung 4.18 skizziert.

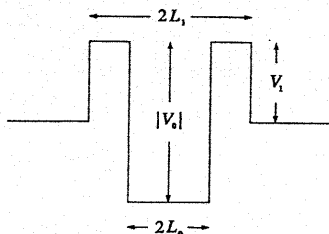


Abbildung 4.18: Potential des Quantendots

Im folgenden wird die Streuung am Potential  $V(x, t)$  quantenmechanisch beschrieben. Dabei wird auch in diesem Fall von nichtwechselwirkenden Teilchen ausgegangen, so daß die Streuung eines Teilchens am Potential  $V(x, t)$  betrachtet wird. Es werden wiederum die in Abschnitt 2.2.3, Seite 46 ff., definierten totalen und partiellen Transmissionen und Reflexionen sowie die effektive Aufenthaltszeit berechnet (siehe Gleichungen (2.70), (2.77), (2.78) und (2.80) auf den Seiten 48-50). Dabei kommt die Wellenpaketpropagationsmethode in gleicher Weise wie im vorangegangenen Fall des lateral oszillierenden Rechtecktopfs zur Anwendung.

Die Streuung an einem zu  $V(x, t)$  analogen Potential wurde von Wagner und Zwerger mit Hilfe der Transfermatrixmethode untersucht [69]. Dabei wurde das Verhalten der Transmission als Funktion der Antriebsfrequenz  $\omega$  für verschiedene Formen des zeitperiodischen Antriebs untersucht.

An dieser Stelle sollen moderat getriebene Systeme untersucht werden, wobei die Frequenz  $\omega$  konstant gehalten wird und die Feldstärke des elektrischen Feldes variiert wird. Im hier verwendeten Bild des lateral oszillierenden Potentials entspricht dies einer Variation der Amplitude  $\lambda$  (siehe Tabelle 2.1, Seite 25). Dabei soll auch demonstriert werden, daß die praktische Anwendbarkeit der in dieser Arbeit entwickelten Wellenpaketpropagationsmethode nicht nur auf muldenförmige, rein anziehende Potentiale beschränkt ist.

Zu diesem Zweck wurden folgende Parameter für das Potential  $V(x, t)$  gewählt:  $V_0 = -1$ ,  $L_0 = 5$ ,  $V_1 = 0.5$ ,  $L_1 = 6$ ,  $\omega = 1$ . Die Amplitude  $\lambda$  der lateralen Oszillation lag zwischen 0 und 2. Für die Masse  $m$  und  $\hbar$  wurde schließlich  $m = 1 = \hbar$  gewählt.

Aufgrund der Doppelbarrierenstruktur des Quantendotpotentials  $U(x)$  aus Gleichung (4.8) kann es zur Ausbildung von quasigebundenen Zuständen mit positiver Energie im Intervall von 0 bis  $V_1$  (siehe Abbildung 4.18) kommen. Ist die Energie des einlaufenden Teilchens gleich der Energie einer dieser quasigebundenen Zustände, so ist in der Transmission durch das zeitunabhängige Potential  $U(x)$ , also bei abgeschaltetem elektrischen Feld, ein Maximum zu erwarten. Dieser Effekt wird als *resonantes Tunneln* bezeichnet. In Abbildung 4.19 ist die totale Transmission als Funktion der Energie des einlaufenden Wellenpakets für  $\lambda = 0$  und  $\lambda = 0.25$  zu sehen. Für  $\lambda = 0$  sind zwei Peaks bei  $E \approx 0.07$  und  $E \approx 0.4$  zu sehen, die beide durch resonantes Tunneln entstehen. Für das schwach getriebene System mit  $\lambda = 0.25$  unterscheidet sich die totale Transmission erwartungsgemäß wenig vom stationären Fall  $\lambda = 0$ . Die Transmission bei  $E \approx 0.07$  ist jedoch etwas niedriger und bei  $E \approx 0.82$  ist eine scharfe Resonanz als ausgeprägtes Minimum in der Transmission sichtbar.

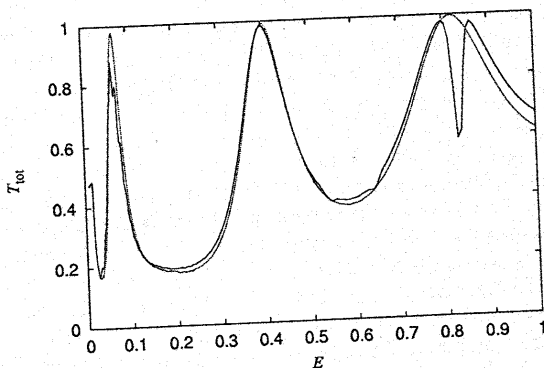


Abbildung 4.19: Totale Transmission  $T_{\text{tot}}$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  für  $\lambda = 0$  (punktierte Linie) und  $\lambda = 0.25$  (durchgezogene Linie).

Für stärker getriebene Systeme sind die Ausbildung weiterer Resonanzen sowie eine Abschwächung des Effekts des resonanten Tunnelns zu erwarten, da die Wahrscheinlichkeit, daß das einlaufende Teilchen die Energie eines (oder mehrerer) Photonen emittiert oder absorbiert, für nicht zu große  $\lambda$  mit zunehmender Stärke des zeitperiodischen Antriebs anwachsen sollte. Abbildung 4.20 zeigt die totale Transmission und die effektive Aufenthaltszeit als Funktion der Energie des einlaufenden Teilchens für  $\lambda = 0, 0.25, 0.5$  und  $0.75$ . Für größere  $\lambda$  unterscheidet sich die Transmission zunehmend von der des zeitunabhängigen Falls  $\lambda = 0$ . Die Ausbildung weiterer, scharfer Resonanzen ist in der effektiven Aufenthaltszeit deutlich zu sehen. Der Mechanismus der Entstehung dieser Resonanzen ist derselbe, der auch in den drei vorangegangenen Anwendungsbeispielen wirksam war und schon in Abschnitt 2.2.2, Seite 43 ff., allgemein beschrieben wurde. Im hier betrachteten Fall können jedoch auch die quasigebundenen Zustände, die für das resonante Tunneln verantwortlich sind, Resonanzen hervorrufen. So ist in Abbildung 4.20 eine Resonanz bei  $E \approx 1.07 = 0.07 + \hbar\omega$  sichtbar. In Abbildung 4.19 wurde bei  $E \approx 0.07$  ein durch resonantes Tunneln hervorgerufen Maximum in der Transmission gefunden.

Im Falle stärker getriebener Systeme sind schließlich Multiphotonenprozesse in den Resonanzen, so wie sie in dieser Arbeit in den beiden untersuchten Systemen mit lokal begrenztem Antrieb gefunden wurden (siehe Abschnitte 3.1.2, 75 ff., und 3.2.2, 91 ff.), zu erwarten. Abbildung 4.21 zeigt die effektive Aufenthaltszeit als Funktion der Energie des einlaufenden Teilchens für die Fälle  $\lambda = 0, 0.5, 1, 1.5$  und  $2$ . Für  $\lambda \geq 1$  sind Resonanzen, die bei Energien von  $l\hbar\omega$  mit  $l = 1, 2, 3$  oberhalb der (quasi-) gebundenen Zustände des effektiven Potentials deutlich sichtbar. Für die Resonanzen mit  $l = 1$  sind nichtlineare Effekte in der Amplitude  $\lambda$  der lateralen Oszillation, die die Feldstärke des äußeren elektrischen Wechselfeldes beinhaltet (siehe Tabelle 2.1, Seite 25), sichtbar. In diesem Fall ist der diabatische Grenzfall erreicht, wie die folgende, grobe Abschätzung zeigt. Ein in der zentralen Mulde des Quantendotpotentials gefangenes Teilchen kann eine maximale Energie von  $|V_0|$  haben. Es legt die Strecke  $2 \cdot 2L_0$  in der Zeit  $\tau_{kl} = 4L_0/\sqrt{2m|V_0|}$  zurück. Für die hier verwendeten Parameter ergibt sich  $\tau_{kl} = \sqrt{2} \cdot 10 \approx 14.2 > 2\pi$ , wobei  $2\pi$  die Periode des zeitabhängigen Potentials ist. Somit ist das effektive Potential durch das zeitgemittelte Potential gegeben.

Die in der Untersuchung der Streuung an einem wechselstromgetriebenen Quantendotpotential gefundenen Resonanzen und Multiphotonenprozesse



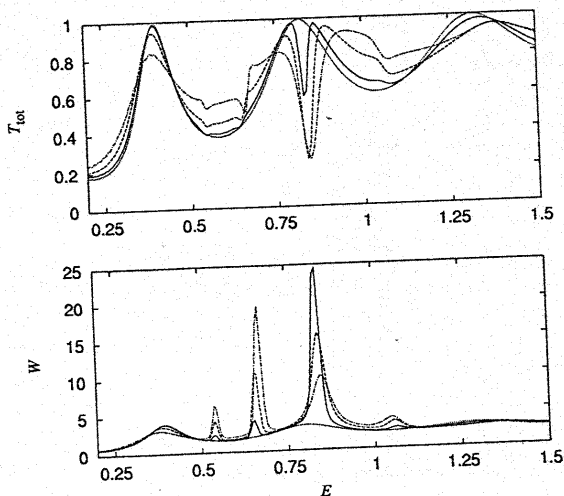


Abbildung 4.20: Totale Transmission  $T_{\text{tot}}$  (oben) und effektive Aufenthaltszeit  $W$  (unten) als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  für  $\lambda = 0$  (punktierte),  $\lambda = 0.25$  (durchgezogene),  $\lambda = 0.5$  (gestrichelte) und  $\lambda = 0.75$  (strichpunktierte Linie).

se sind in analoger Weise zu den entsprechenden Ergebnissen der weiteren behandelten Anwendungsbeispiele – in diesen Fällen waren die betrachteten Potentiale muldenförmig ohne Tunnelbarrieren – zu verstehen. Diese Effekte wurden sowohl in Systemen mit lokal begrenztem Antrieb als auch in Systemen mit wechselstromartigem Antrieb gefunden und sind typisch für beliebige, zeitperiodische Potentiale, deren zugehörige effektive Potentiale (quasi-) gebundene Zustände besitzen. Der für Doppelbarrieren typische Effekt des resonanten Tunnelns sowie die Abschwächung dieses Effekts durch das Einschalten eines äußeren, zeitabhängigen Feldes konnte ebenfalls beobachtet werden. Für die hier gewählten Parameter kann der Effekt des Photon-assisted-tunneling nicht auftreten, da die Photonenenergie  $\hbar\omega$  größer als Barrierenhöhe  $V_1$  ist, so daß die Seitenbänder zu den das resonante Tunneln her-

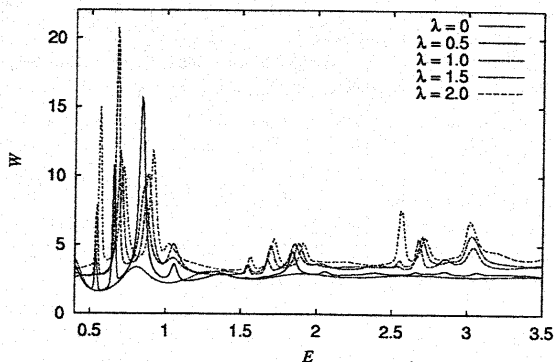


Abbildung 4.21: Effektive Aufenthaltszeit  $W$  als Funktion der einlaufenden Energie  $E$  für  $\lambda = 0, 0.5, 1, 1.5$  und  $2$ .

vorrufenden, quasigebundenen Zuständen schon oberhalb der Doppelbarriere liegen.

# Kapitel 5

## Zusammenfassung und Ausblick

Es wurden Streusysteme mit zeitperiodischen Potentialen sowohl klassisch als auch quantenmechanisch untersucht. Im Rahmen der quantenmechanischen Behandlung wurde zunächst gezeigt, daß sich Streusysteme mit zeitlich periodischen Potentialen in beliebiger Dimension analog zu den üblicherweise betrachteten Systemen mit zeitunabhängigen Potentialen beschreiben lassen. Aufgrund der periodischen Zeitabhängigkeit bleibt die Quasienergie bei der Streuung erhalten und die S-Matrix erhält mit den Floquetmoden zusätzliche Streukanäle. Es konnten im Rahmen der allgemeinen theoretischen Beschreibung Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen für die Streuung an zeitlich periodischen Potentialen hergeleitet werden.

Bei der Behandlung zeitperiodischer Streusysteme mit wechselstromartigem Antrieb bzw. einem zeitperiodischen Antrieb durch ein Laser- oder Mikrowellenfeld, der in Dipolnäherung beschrieben werden kann, wurde die Kramers-Henneberger-Transformation sowohl klassisch als auch quantenmechanisch ausführlich besprochen. Mit ihrer Hilfe lassen sich wechselstromgetriebene Systeme, in denen das Potential auch für große Abstände nicht verschwindet, in Systeme mit einem lateral oszillierenden Potential, das die Definition asymptotisch freier Zustände erlaubt, transformieren.

Zur quantenmechanischen Beschreibung der Streuung an zeitperiodischen Potentialen wurde schließlich die Wellenpaketpropagationsmethode entwickelt. Dabei werden die Streuung charakterisierende Größen aus der (stroboskopisch verfolgten) Zeitevolution von Wellenpaketen bestimmt. Totale und partielle Transmission bzw. Reflexion und eine effektive Aufenthaltszeit stellen diese charakteristischen Größen dar. Für den Fall eines wechselstromartigen Antriebs werden die Eigenschaften der Kramers-Henneberger-

Transformation vollständig ausgenutzt. Die  $(t, t')$ -Methode zur Berechnung des Zeitentwicklungsoperators wurde für offene Systeme implementiert. Die Verwendung der  $(t, t')$ -Methode garantiert dabei, daß die Wellenpaketpropagationsmethode im Prinzip für beliebige Frequenzen und für beliebige Stärken des zeitperiodischen Teils des Potentials anwendbar ist. Sie läßt sich daher als nichtstörungstheoretisch und nichtadiabatisch sowie als nichtsemiklassisch, also als vollständig quantenmechanisch bezeichnen.

Die  $(t, t')$ -Methode, und damit auch die Wellenpaketpropagationsmethode, ist am effizientesten im Falle harmonisch getriebener Systeme, die für viele Anwendungen wesentlich realistischer sind als periodisch geklickte Systeme, für die sich jedoch der Zeitentwicklungsoperator über eine Periode erheblich leichter berechnen läßt.

Im Rahmen der klassischen Beschreibung zeitperiodischer Streusysteme wurden übliche Methoden zur Klassifizierung des Typs der Dynamik wie die Untersuchung stroboskopischer Phasenraumabbildungen und der Ablenkfunktion sowie die Berechnung der Verteilung der Aufenthaltszeiten verwendet. Ferner wurde das klassische Analogon der Kramers-Henneberger-Transformation behandelt.

Es wurden zwei Klassen von zeitperiodischen Streusystemen untersucht: Systeme, in denen der zeitperiodische Antrieb in einem räumlich begrenzten Gebiet erfolgt und Systeme, die einem wechselstromartigen Antrieb unterworfen sind. Im Falle des lokal begrenzten Antriebs sind die Konzepte der Streutheorie direkt anwendbar. Für einen wechselstromartigen Antrieb kann mittels der Kramers-Henneberger-Transformation eine Darstellung erreicht werden, die die Anwendung der Konzepte der Streutheorie zuläßt. Die genaue Form des Streupotentials unterliegt dabei keiner weiteren prinzipiellen Einschränkung, außer der, daß die jeweiligen instantanen Potentiale die Definition asymptotisch freier Zustände zulassen müssen.

Aus jeder der beiden Systemklassen wurden jeweils zwei räumlich eindimensionale Beispielsysteme genauer untersucht. Aus der Klasse lokal getriebener Systeme wurden der Rechtecktopf mit oszillierendem Boden und das ebenfalls vertikal oszillierende  $1/\cosh^2$ -Potential betrachtet. Als Vertreter wechselstromgetriebener Systeme wurden der auf diese Weise getriebene Rechtecktopf und ein Quantendot mit gleichem Antrieb untersucht. Mit Ausnahme des wechselstromgetriebenen Quantendots, für den nur die quantenmechanische Behandlung durchgeführt wurde, wurden alle Beispielsysteme sowohl klassisch als auch quantenmechanisch detailliert untersucht. Mit dieser Auswahl von Beispielsystemen konnte gezeigt werden, daß die hier

entwickelte Methode sowohl für muldenförmige als auch für aus Barrieren und Mulden zusammengesetzte Potentiale anwendbar ist. Die betreffenden Potentiale können dabei entweder stetig sein oder endliche Potentialsprünge enthalten.

Im Rahmen der klassischen Beschreibung der Streuung sind nur rein anziehende Potentiale, für die  $V(x, t) \leq 0$  gilt und die aus nur einer Mulde bestehen, untersucht worden, da sich in diesen Systemen alle Typen nichtlinearer Dynamik finden lassen.

Im einzelnen wurden im Rahmen der klassischen Beschreibung der Streuung folgende Ergebnisse gefunden: Im Falle des oszillierenden  $1/\cosh^2$ -Potentials und des wechselstromgetriebenen Rechtecktopfs konnte chaotische Streuung beobachtet werden: Ein wechselstromgetriebener Rechtecktopf mit starkem Antrieb verhält sich wie ein hyperbolisches System. Ein gemischter Phasenraum ist im Falle des  $1/\cosh^2$ -Potentials für den gesamten untersuchten Parameterbereich und im Falle eines wechselstromgetriebenen Rechtecktopfs mit moderatem Antrieb gefunden worden. Als pseudointegrable Systeme sind der Rechtecktopf mit oszillierendem Boden im gesamten untersuchten Parameterbereich und ein wechselstromgetriebener Rechtecktopf im diabatischen Limes, was einem extrem starken (und hochfrequentem) Antrieb entspricht, zu bezeichnen.

Im Rahmen der quantenmechanischen Behandlung der Streuung ist im diabatischen Grenzfall die Existenz eines effektiven Potentials zu erwarten. Einige Charakteristika dieses Potentials sollten in der totalen und den partiellen Transmissionen und der effektiven Aufenthaltszeit sichtbar sein. Diese Erwartung konnte in der Untersuchung aller vier Beispielsysteme bestätigt werden. Für zeitperiodische Streupotentiale, in denen sich die Form des instantanen Potentials im Verlauf einer Periode nicht oder nur geringfügig ändert, ist die Existenz eines effektiven Potentials ebenfalls im adiabatischen Grenzfall zu erwarten. Ein solches Verhalten wurde bei der Untersuchung der Streuung am wechselstromgetriebenen Rechtecktopf gefunden. Ist ein effektives Potential (im diabatischen oder adiabatischen Grenzfall) vorhanden und besitzt dieses gebundene oder quasigebundene Zustände, so sind Resonanzen zu erwarten, die bei Energien des einlaufenden Teilchens liegen, die sich um ein ganzzahliges Vielfaches der Photonenenergie  $\hbar\omega$  von den Energien der (quasi-) gebundenen Zustände unterscheiden. Solche Resonanzen konnten in der Behandlung aller vier Beispielsysteme gefunden werden. In der Behandlung der Streuung am Rechtecktopf mit oszillierendem Boden, dem  $1/\cosh^2$ -Potential und dem wechselstromgetriebenen Quantendot

konnten ferner Multiphotonenprozesse an den Resonanzenergien nachgewiesen werden. Desweiteren sind in diesen Fällen auch nichtlineare Effekte in der Stärke des zeitperiodischen Antriebs, die in der effektiven Aufenthaltszeit besonders deutlich sichtbar sind, gefunden worden.

Im Falle der Streuung an einem wechselstromgetriebenen System bzw. der Streuung an einem lateral oszillierenden Potential kann das effektive Potential im diabatischen Grenzfall eine Doppelmuldenform annehmen, obwohl das instantane Potential nur aus einer Mulde besteht. Ein Resonanzdublett, das einem Tunneldublett im Spektrum des effektiven Potentials zugeordnet werden kann, wurde beobachtet. Die diese Tunnelaufspaltung hervorrufende Doppelmulde kommt jedoch erst durch die "effektive Zeitmittelung im diabatischen Grenzfall" zustande. In diesem Sinne läßt sich das in der Zeitentwicklung eines am lateral oszillierenden Rechtecktopf gestreuten Wellenpakets beobachtete Durchtunneln der Barriere zwischen den beiden Mulden des effektiven Potentials als dynamisches Tunneln bezeichnen.

In allen Anwendungsbeispielen konnten in der quantenmechanischen Behandlung nur rein quantenmechanische Parameterbereiche untersucht werden. Dies ist aus der niedrigen Anzahl (quasi-) gebundener Zustände in den instantanen bzw. effektiven Potentialen ersichtlich.

Für die Streuung am wechselstromgetriebenen Rechtecktopf wurde die Korrespondenz zwischen der quantenmechanischen und klassischen Beschreibung untersucht. Zu diesem Zweck wurde die zeitintegrierte Husimidichte an den beobachteten Resonanzenergien berechnet. Sowohl im Falle eines moderaten Antriebs als auch im Falle eines stark getriebenen Systems liegen die Maxima der Husimidichte zumindest näherungsweise in den für klassische Streubahnen zugänglichen Bereichen des Phasenraums. Eine feinere Auflösung der Strukturen im klassischen Phasenraum kann im hier untersuchten rein quantenmechanischen Regime allerdings nicht erwartet werden.

Die im Rahmen der quantenmechanischen Behandlung beobachteten Effekte sollten im Prinzip mit dem heutigen Stand der Experimentiertechnik in mesoskopischen Systemen experimentell zugänglich sein. Dies trifft insbesondere auch auf den bei der Streuung am wechselstromgetriebenen Rechtecktopf gefundenen dynamischen Tunnelleffekt zu. Auf theoretischer Seite ist die hier entwickelte Wellenpaketpropagationsmethode prinzipiell in der Lage, den Transport durch realistische, eindimensionale mesoskopische Systeme unter dem Einfluß eines zeitperiodischen Antriebs im Rahmen einer streutheoretischen Beschreibung mit Hilfe von nichtwechselwirkenden Teilchen zu behandeln. Mögliche Anwendungsbeispiele wären z. B. der Transport durch

Quantenpunktkontakte oder Quantendots in der Anwesenheit eines elektrischen Wechselfeldes und damit auch die Beschreibung des Photon-assisted-tunneling in diesen Fällen. Weitere mögliche konkrete Anwendungsbeispiele können auch aus den Gebieten des Quantenchaos, der Atomphysik oder auch der Oberflächenphysik stammen.

Im Falle der Beschreibung des elektronischen Transports in mesoskopischen Systemen wäre eine Berücksichtigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung wünschenswert, da eine zufriedenstellende Beschreibung stark getriebener, wechselwirkender Systeme noch nicht gefunden wurde (dieses Problem ist Gegenstand aktueller Forschung, siehe z. B. [136]). Weiterhin steht eine vollständige Erweiterung der Landauer-Büttiker-Theorie auf zeitperiodische Potentiale innerhalb des Wechselwirkungsbereichs noch aus. Schließlich wäre in diesem Zusammenhang eine Erweiterung der Wellenpaketpropagationsmethode auf Streupotentiale, deren asymptotischer Wert weit außerhalb des Wechselwirkungsbereichs für die zwei verschiedenen Raumrichtungen unterschiedlich ist, ein wertvoller Beitrag zur Verbesserung der Beschreibung von Transportphänomenen. Hier könnte die Verwendung anderer Randbedingungen, z. B. absorbierender anstatt periodischer Randbedingungen, zu einer erfolgreichen Erweiterung der Wellenpaketpropagationsmethode führen. Auf diese Weise könnte die Antwort des Systems über die lineare Antworttheorie hinaus beschrieben werden.

Zeitperiodische Streu- bzw. Transportprobleme stellen eine in mehreren Gebieten der Physik wichtige Problemklasse dar. Dabei sind sowohl die allgemeine theoretische Beschreibung solcher physikalischer Systeme als auch die Modellierung konkreter, experimentell zugänglicher Anordnungen von großem Interesse. In vielen Fällen können diese Probleme als räumlich eindimensionale Systeme, deren klassische Beschreibung zu chaotischer Dynamik führen kann, angesehen werden. Eine große Anzahl solcher Systeme läßt sich mit Hilfe der hier entwickelten Wellenpaketpropagationsmethode quantenmechanisch behandeln. Zudem sollte die hier vorgestellte Vorgehensweise auf weitere Problemklassen übertragbar sein. Vor diesem Hintergrund stellt die Wellenpaketpropagationsmethode ein effizientes und vielseitig einsetzbares Hilfsmittel zur Beschreibung stark getriebener offener Systeme dar.

# Anhang A

## Tien-Gordon-Theorie

Zur Beschreibung des Phänomens des *Photon-assisted-tunneling* wird häufig die Tien-Gordon-Theorie [39] herangezogen (siehe z. B. [30]). Tien und Gordon verfolgten das Ziel, den Tunnelstrom durch eine Supraleiter-Normalleiter-Supraleiter-Anordnung in Anwesenheit eines Mikrowellenfeldes theoretisch zu beschreiben und erstellten das in Abbildung A.1 skizzierte Modell.

Der Hamiltonoperator in Bereich  $A$  sei durch  $H_0$  und der in Bereich  $B$  durch  $H_0 + eV \cos(\omega t)$  gegeben. Die Wellenfunktionen in beiden Bereichen, die *getrennt* betrachtet werden, sind durch

$$\psi_A(x, t) = \phi(x) e^{-iEt/\hbar} \quad (\text{A.1})$$

in Bereich  $A$  und

$$\psi_B(x', t) = \phi(x') e^{-iEt/\hbar} \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n\left(\frac{eV}{\hbar\omega}\right) e^{-in\omega t} \quad (\text{A.2})$$

in Bereich  $B$  gegeben, wobei  $J_n(z)$  die Besselfunktion  $n$ -ter Ordnung ist. Für Bereich  $B$  wurde der Ansatz gemacht, daß  $\psi_B(x', t)$  dieselbe Ortsabhängigkeit wie  $\psi_A(x, t)$  besitzen soll. Weiterhin wird angenommen, daß  $\psi_A(x, t)$  die zeitabhängige Schrödingergleichung im Bereich  $A$  erfüllt.

Mit diesem Ansatz lautet die modifizierte Zustandsdichte in Bereich  $B$

$$\rho'(E) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \rho(E + n\hbar\omega) \left( J_n\left(\frac{eV}{\hbar\omega}\right) \right)^2, \quad (\text{A.3})$$



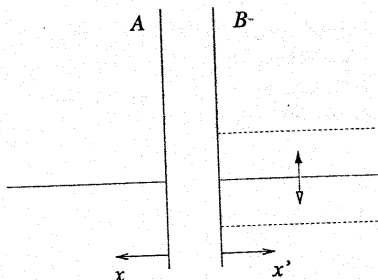


Abbildung A.1: Tien-Gordon-Modell: Die Bereiche A und B sind durch eine Tunnelbarriere getrennt. In Bereich B ist das Potential zeitperiodisch.

wobei  $\rho(E)$  die Zustandsdichte in Bereich A bezeichnet. Für die totale Transmission ergibt sich analog

$$T_{\text{tot}}(E, V) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} T_{\text{tot}}(E + n\hbar\omega, V = 0) \left( J_n \left( \frac{eV}{\hbar\omega} \right) \right)^2. \quad (\text{A.4})$$

Diese Gleichung kann die in den Anwendungsbeispielen in Kapitel 3 im diabatischen Grenzfall gefundenen Resonanzen und die weitgehende Unabhängigkeit ihrer Positionen auf der Energieachse von der Amplitude  $V$  des zeitabhängigen Teils des Potentials sicherlich nicht erklären.

Tunnelt, oder allgemeiner ausgedrückt, bewegt sich das Teilchen mit der Energie  $E$  aus dem Bereich B in den Bereich A und "vergißt" dabei seine Wellenfunktion, während es sich an seine Energie "erinnert", so kann es aufgrund des zeitperiodischen Mikrowellenfeldes in Zustände mit den Energien  $E \pm \hbar\omega$ ,  $E \pm 2\hbar\omega$  usw. in Bereich A gelangen. In der gerade skizzierten mathematischen Beschreibung des Tien-Gordon-Modells ist der Verlust der "Kohärenz" der Wellenfunktion daran zu erkennen, daß weder die Wellenfunktionen noch ihre ersten Ableitungen an der Grenze zwischen den Bereichen A und B stetig sind (siehe auch [1] für eine kurze Zusammenstellung der Tien-Gordon-Theorie). Im Rahmen der Tien-Gordon-Theorie ist die Wahrscheinlichkeit, einen Zustand der Energie  $E + n\hbar\omega$  in A zu besetzen, proportional zum Quadrat der Besselfunktion  $n$ -ter Ordnung  $J_n^2((eV)/(\hbar\omega))$ .

Diese Konstruktion zeigt, daß nur elastische Prozesse (im Sinne der Quasienergieerhaltung!), bei denen aber die "Kohärenz" verloren geht, erfolgreich

mit Hilfe der Tien-Gordon-Theorie beschrieben werden können. Diese Voraussetzungen sind sicherlich nicht in allen Anwendungen erfüllt. Bei der in dieser Arbeit verwendeten Wellenpaketpropagationsmethode ist jedoch diese "Kohärenz" der Wellenfunktion über den gesamten Ortsraum gewährleistet.

## Anhang B

# Ergänzungen der Streutheorie zeitperiodischer Potentiale

### B.1 Herleitung der Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen

Die folgenden Rechnungen basieren auf den entsprechenden Herleitungen in Referenz [56]. Dort wurde der Spezialfall periodisch geklickter Potentiale betrachtet. Zur Beschreibung beliebiger zeitperiodischer Streupotentiale sind jedoch nur geringfügige Änderungen notwendig.

Die Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen lassen sich aus

$$|\psi_{\epsilon,n,\alpha}^0\rangle = \Omega_{\pm}^{\dagger} |\psi_{\epsilon,n,\alpha}^{\pm}\rangle \quad (\text{B.1})$$

und

$$\Omega_{\pm}^{\dagger} = \lim_{n \rightarrow \infty} (u_0)^{\pm n} u^{\mp n} \quad (\text{B.2})$$

unter der Annahme herleiten, daß der Grenzwert in der letzten Gleichung existiert. Die Herleitung erfolgt in zwei Schritten. Zunächst wird die Beziehung

$$\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} = \Omega_{\pm}^{\dagger} \quad (\text{B.3})$$

gezeigt, die dann in Gleichung (B.1) eingesetzt wird.

Die angenommene Gültigkeit von Gleichung (B.2) ist gleichbedeutend mit

$$\| u_0^{\pm N} u^{\mp N} - \Omega_{\pm}^{\dagger} \| < \Delta \quad \text{für } N > \tilde{N}(\Delta). \quad (\text{B.4})$$

Für ein beliebiges  $\Delta > 0$  existiert ein endliches  $\tilde{N}(\Delta)$ , somit gilt für  $N > \tilde{N}(\Delta)$

$$\begin{aligned}
 & \left\| \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} - \Omega_{\pm}^{\dagger} \right\| = \\
 & = \left\| \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=0}^N e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} + \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} - \Omega_{\pm}^{\dagger} \right\| \\
 & = \left\| 0 + \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} - \Omega_{\pm}^{\dagger} \right\| \\
 & \leq \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{-\delta n} \left\| u_0^{\pm n} u^{\mp n} - \Omega_{\pm}^{\dagger} \right\| \\
 & < \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{-\delta n} \Delta. \tag{B.5}
 \end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned}
 \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \delta \sum_{n=N+1}^{\infty} e^{-\delta n} &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left\{ \delta \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta n} - \delta \sum_{n=0}^N e^{-\delta n} \right\} \\
 &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{\delta}{1 - e^{-\delta}} - 0 = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{\delta}{\delta} = 1
 \end{aligned}$$

folgt Beziehung (B.3).

Desweiteren gilt im Limes  $\delta \rightarrow 0^+$

$$\delta \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm(n-1)} (u_0^{\pm 1} u^{\mp 1} - 1) u^{\mp(n-1)} \tag{B.6}$$

aufgrund von

$$\begin{aligned}
 1 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm(n-1)} (u_0^{\pm 1} u^{\mp 1} - 1) u^{\mp(n-1)} &= \\
 = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} - \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm(n-1)} u^{\mp(n-1)} &= \\
 = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n} - e^{-\delta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n}
 \end{aligned}$$

$$\simeq (1 - 1 + \delta) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm n} u^{\mp n}.$$

Setzt man schließlich (B.3) in der Darstellung (B.6) in Gleichung (B.1) ein, so ergibt sich

$$\begin{aligned} |\psi_{\epsilon, n, \alpha}^0\rangle &= \Omega_{\pm}^{\dagger} |\psi_{\epsilon, n, \alpha}^{\pm}\rangle \\ &= \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left\{ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\delta n} u_0^{\pm(n-1)} (u_0^{\pm 1} u^{\mp 1} - 1) u^{\mp(n-1)} \right\} |\psi_{\epsilon, n, \alpha}^{\pm}\rangle \\ &= \left\{ 1 + \right. \\ &\quad \left. \lim_{\delta \rightarrow 0^+} e^{-\delta} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\delta(n-1)} e^{\pm i T \epsilon(n-1)/\hbar} u_0^{\pm(n-1)} (u_0^{\pm 1} u^{\mp 1} - 1) \right\} |\psi_{\epsilon, n, \alpha}^{\pm}\rangle \\ &= \left\{ 1 - e^{\mp i T \epsilon/\hbar} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} (u_0^{\pm 1} - e^{(\mp i T \epsilon/\hbar) + \delta})^{-1} (u_0^{\pm 1} u^{\mp 1} - 1) \right\} |\psi_{\epsilon, n, \alpha}^{\pm}\rangle. \end{aligned}$$

Die Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen (2.58), Seite 40, folgen unmittelbar aus der letzten Relation.

## B.2 Elemente der S-Matrix

Auch in diesem Fall basieren die folgenden Rechnungen auf den entsprechenden Herleitungen in Referenz [56]. Die zur Beschreibung beliebiger zeitperiodischer Streupotentiale notwendigen Änderungen sind ebenfalls nur geringfügig.

Die Definition der S-Matrix  $S = \Omega_{-}^{\dagger} \Omega_{+}$  und die Unitarität der Mølleroperatoren liefern

$$\begin{aligned} \langle (\Omega_{+} - \Omega_{-}) \psi | \Omega_{+} \phi \rangle &= \langle \psi | (\Omega_{+}^{\dagger} \Omega_{+} - \Omega_{-}^{\dagger} \Omega_{+}) \phi \rangle \\ &= \langle \psi | \phi \rangle - \langle \psi | S \phi \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Mit  $\Omega_n := u^n u_0^{-n}$ ,  $n \in \mathbb{Z}$ , ist  $\Omega_{\pm} = \lim_{n \rightarrow \pm \infty} \Omega_n$ . Die Differenz der beiden Mølleroperatoren läßt sich formal als

$$\Omega_{+} - \Omega_{-} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} u^k (u u_0^{-1} - 1) u_0^{-k}$$

schreiben. Löst man Gleichung (B.7) nach  $\langle \psi | S \phi \rangle$  auf, so ergibt sich unter Benutzung der letzten Beziehung und mit  $\langle \psi | = \langle \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 |$  sowie  $|\phi\rangle = |\psi_{\epsilon', m, \beta}^0\rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 | S \psi_{\epsilon', m, \beta}^0 \rangle &= \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} \\
 &\quad - \sum_{k=-\infty}^{\infty} \langle u^k (u u_0^{-1} - 1) u_0^{-k} \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 | \Omega_+ \psi_{\epsilon', m, \beta}^0 \rangle \\
 &= \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} \\
 &\quad - \sum_{k=-\infty}^{\infty} \langle (u u_0^{-1} - 1) e^{iT\epsilon k/\hbar} \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 | u^{-k} \psi_{\epsilon', m, \beta}^+ \rangle \\
 &= \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} \\
 &\quad - \sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{iT k(\epsilon' - \epsilon)/\hbar} \langle (u u_0^{-1} - 1) \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 | \psi_{\epsilon', m, \beta}^+ \rangle.
 \end{aligned}$$

Die Darstellung der  $\delta$ -Funktion

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{iT k(\epsilon' - \epsilon)/\hbar} = 2\pi \delta\left(\frac{T}{\hbar}(\epsilon' - \epsilon)\right) = 2\pi \frac{\hbar}{T} \delta(\epsilon' - \epsilon)$$

führt schließlich auf

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 | S \psi_{\epsilon', m, \beta}^0 \rangle &= \delta(\epsilon - \epsilon') \left\{ \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta} \right. \\
 &\quad \left. - \frac{2\pi\hbar}{T} \langle (u u_0^{-1} - 1) \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 | \psi_{\epsilon', m, \beta}^+ \rangle \right\}. \quad (\text{B.8})
 \end{aligned}$$

Diese Beziehung ist äquivalent zu Gleichung (2.60) mit (2.61) (siehe Seite 40). Wählt man als Ausgangspunkt

$$\begin{aligned}
 \langle \Omega_- \psi | (\Omega_+ - \Omega_-) \phi \rangle &= \langle (\Omega_+ - \Omega_- - 1) \psi | \phi \rangle \\
 &= \langle \psi | S \phi \rangle - \langle \psi | \phi \rangle
 \end{aligned}$$

und setzt wieder  $\langle \psi | = \langle \psi_{\epsilon, n, \alpha}^0 |$  sowie  $|\phi\rangle = |\psi_{\epsilon', m, \beta}^0\rangle$ , so ergibt eine analoge Rechnung Gleichung (2.60) mit (2.62).

### B.3 Der Grenzfall stationärer Streusysteme

Für zeitunabhängige Systeme gilt

$$u_0 = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} H_0 T\right\}, \quad u = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} (H_0 + V) T\right\}. \quad (\text{B.9})$$

Für kleine  $T$  gilt bis zur ersten Ordnung

$$u_0 \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} H_0 T, \quad u \simeq 1 - \frac{i}{\hbar} (H_0 + V) T. \quad (\text{B.10})$$

Daraus folgt

$$u_0^{\pm 1} u^{\mp 1} - 1 \simeq \pm \frac{i}{\hbar} V T. \quad (\text{B.11})$$

Für die  $\tilde{G}_0^{\pm}(\epsilon)$  aus den Analoga der Lippmann-Schwinger-Gleichungen (2.58) gilt

$$\tilde{G}_0^{\pm}(\epsilon) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} (u_0^{\pm 1} e^{\pm i T \epsilon / \hbar} - e^{\delta})^{-1}.$$

Im Falle zeitunabhängiger Systeme ist  $\epsilon = E$  und man erhält für  $T \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_0^{\pm}(E) &\simeq \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left( 1 \pm \frac{i}{\hbar} (E - H_0) T - e^{\delta} \right)^{-1} \\ &\simeq \pm \frac{\hbar}{iT} \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \left( \pm \frac{\hbar}{iT} (1 - 1 - \delta) + E - H_0 \right)^{-1} \\ &\simeq \pm \frac{\hbar}{iT} \lim_{\delta' \rightarrow 0^+} (E \pm i\delta' - H_0)^{-1} \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

mit  $\delta' = (\hbar/T)\delta$ . Mit den Beziehungen (B.11) und (B.12) folgt somit für das Produkt

$$\tilde{G}_0^{\pm}(E) (u_0^{\pm 1} u^{\mp 1} - 1) \simeq \lim_{\delta' \rightarrow 0^+} (E \pm i\delta' - H_0)^{-1} V. \quad (\text{B.13})$$

Dies ist genau der Ausdruck, der in die Lippmann-Schwinger-Gleichungen (2.31) auf Seite 33 eingeht.

Für die Elemente der  $T^{\pm}$ -Matrix aus Gleichung (2.60) (Seite 40) gilt wegen  $u u_0^{-1} - 1 \simeq -i V T / \hbar$

$$T_{n=0, \alpha; m=0, \beta}^+ \simeq \langle V \psi_{E,0,\alpha}^0 | \psi_{E,0,\beta}^+ \rangle = \langle \psi_{E,0,\alpha}^0 | V | \psi_{E,0,\beta}^+ \rangle. \quad (\text{B.14})$$

Eine analoge Rechnung liefert für  $T_{n=0, \alpha; m=0, \beta}^-$  das Ergebnis

$$T_{n=0, \alpha; m=0, \beta}^- \simeq \langle \psi_{E,0,\alpha}^- | V | \psi_{E,0,\beta}^0 \rangle. \quad (\text{B.15})$$

Im Limes  $T \rightarrow 0$  werden die Gleichungen (2.60) also zu

$$\begin{aligned} \langle \psi_{E,0,\alpha}^0 | S | \psi_{E',0,\beta}^0 \rangle &= \delta(E - E') \{ \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \langle \psi_{E,0,\alpha}^0 | V | \psi_{E,0,\beta}^+ \rangle \} \\ &= \delta(E - E') \{ \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \langle \psi_{E,0,\alpha}^- | V | \psi_{E,0,\beta}^0 \rangle \} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Diese Ausdrücke stimmen mit denen aus der Theorie der Streuung an zeitunabhängigen Potentialen bekannten Ausdrücken für die Elemente der S-Matrix überein [54, 115].

# Anhang C

## Details der Kramers-Henneberger-Transformation

Gleichung (2.107) folgt aus (2.105), indem Relation (2.106) in die Schrödingergleichung im Wechselstrombild eingesetzt wird. Dabei treten folgende Terme auf:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}xp(t) + iG(t)\right\} \times \left(-\frac{(p(t))^2}{\hbar^2}\phi(\xi, t) + 2\frac{i}{\hbar}p(t)\frac{\partial \phi}{\partial \xi}(\xi, t) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}(\xi, t)\right), \quad (\text{C.1})$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}xp(t) + iG(t)\right\} \times \left(\left(\frac{i}{\hbar}xf(t) + i\dot{G}(t)\right)\phi(\xi, t) + \frac{\partial \phi}{\partial t}(\xi, t) - \frac{p(t)}{m}\frac{\partial \phi}{\partial \xi}(\xi, t)\right), \quad (\text{C.2})$$

wobei die Abkürzungen

$$G(t) := -\frac{1}{2m\hbar} \int^t dt' (p(t'))^2, \quad \dot{G}(t) := \frac{dG}{dt}(t) \quad (\text{C.3})$$

benutzt wurden. Zur Herleitung von Gleichung (C.1) wurde die für  $\xi = x - q(t)$  geltende Relation

$$\left.\frac{\partial}{\partial x}\right|_{t=\text{const}} = \left.\frac{\partial}{\partial \xi}\right|_{t=\text{const}} \quad (\text{C.4})$$



verwendet. Für die partielle Ableitung nach  $t$  ist jedoch zu beachten, daß für zwei Funktionen  $f = f(\xi, t)$  und  $F = F(x, t)$  gilt [137]

$$\begin{aligned}\frac{\partial F}{\partial t}(x, t) &= \frac{\partial f}{\partial \xi}(\xi, t) \frac{\partial(\xi = x - q(t))}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial t}(\xi, t) \frac{\partial(t = t)}{\partial t} \\ &= -\dot{q}(t) \frac{\partial f}{\partial \xi}(\xi, t) + \frac{\partial f}{\partial t}(\xi, t),\end{aligned}\quad (\text{C.5})$$

was bei der Herleitung von Gleichung (C.2) benutzt wurde. Setzt man die Relationen (C.1) und (C.2) in die Schrödingergleichung (2.105) ein, so fallen die Terme proportional zu  $p(t) \cdot (\partial\phi/\partial\xi)$  heraus, und es folgt die Schrödingergleichung (2.107) in der Darstellung des lateral oszillierenden Potentials.

Die Äquivalenz von Gleichung (2.107) und der Schrödingergleichung (2.109) in Darstellung mit Hilfe eines zeitperiodischen Vektorpotentials erfolgt durch Einsetzen von Relation (2.108) in Gleichung (2.109). Dabei treten folgende Terme auf:

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + p(t) \right)^2 \Phi(x, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{2m\hbar} \int^t dt' (p(t'))^2 \right\} \times \quad (\text{C.6})$$

$$\begin{aligned}&\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2}(\xi, t) - i\hbar \frac{p(t)}{m} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}(\xi, t) + \frac{(p(t))^2}{2m} \phi(\xi, t) \right), \\ \frac{\partial \Phi}{\partial t}(x, t) &= \exp \left\{ -\frac{i}{2m\hbar} \int^t dt' (p(t'))^2 \right\} \times \quad (\text{C.7}) \\ &\left( -\frac{i(p(t))^2}{2m\hbar} \phi(\xi, t) - \frac{p(t)}{m} \frac{\partial \phi}{\partial \xi}(\xi, t) + \frac{\partial \phi}{\partial t}(\xi, t) \right),\end{aligned}$$

wobei wiederum die Relationen (C.4) und (C.5) benutzt wurden. Nach dem Einsetzen der beiden letzten Relationen in die Schrödingergleichung (2.109) fallen, ebenso wie im vorangegangenen Fall, die Terme proportional zu  $p(t) \cdot (\partial\phi/\partial\xi)$  heraus, und es folgt die Schrödingergleichung (2.107).

Die direkte Verbindung zwischen den Schrödingergleichungen im Wechselstrombild (2.105) und der Darstellung mit Hilfe eines zeitperiodischen Vektorpotentials (2.109) ist durch die Eichtransformation (2.110) gegeben. Analog zu den beiden vorigen Fällen wird Relation (2.110) in die Schrödingergleichung (2.109) eingesetzt. Die auftretenden Terme sind

$$\frac{1}{2m} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + p(t) \right)^2 \Phi(x, t) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} x p(t) \right\} \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) \right) \quad (\text{C.8})$$

und

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t}(x, t) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}xp(t)\right\} \left(xf(t)\psi(x, t) + i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}(x, t)\right). \quad (\text{C.9})$$

Die obere der beiden Relationen folgt aus

$$\begin{aligned} \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + p(t)\right)^2 \Phi(x, t) = \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}(x, t) - i\frac{\hbar}{m} p(t) \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, t) + \frac{(p(t))^2}{2m} \Phi(x, t) \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial x}(x, t) &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}xp(t)\right\} \left(-\frac{i}{\hbar}p(t)\psi(x, t) + \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t)\right), \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2}(x, t) &= \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}xp(t)\right\} \times \\ &\quad \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}(x, t) - 2\frac{i}{\hbar}p(t) \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, t) - \frac{(p(t))^2}{\hbar^2} \psi(x, t)\right). \end{aligned}$$

Analog zu den beiden vorangegangenen Fällen liefert schließlich das Einsetzen der Relationen (C.8) und (C.9) in Gleichung (2.109) die Schrödingergleichung (2.105) im Wechselstrombild.

## Anhang D

# Fourierentwicklung des lateral oszillierenden Rechteckpotentials

Die Fourierreihe des lateral oszillierenden Rechteckpotentials lautet

$$\begin{aligned} V(x, t) &= V \theta(L - |x - \lambda \cos(\omega t)|) \\ &= \frac{a_0(x)}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} \left( a_j(x) \cos(j\omega t) + b_j(x) \sin(j\omega t) \right). \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

Aufgrund der Symmetrie  $V(x, t) = V(x, -t)$  gilt  $b_j(x) = 0$  für alle positiven, ganzzahligen  $j$  und

$$a_j(x) = \frac{2}{T} \int_0^T dt V(x, t) \cos(j\omega t) \quad , \quad j \in \mathbb{N}. \quad (\text{D.2})$$

Das Zeitmittel des lateral oszillierenden Rechteckpotentials ist durch

$$\bar{V}(x) = \frac{a_0(x)}{2} = \frac{1}{T} \int_0^T dt V(x, t) \quad (\text{D.3})$$

gegeben. Mit der Substitution  $\tau := \omega t$  und unter Benutzung von

$$\theta(\alpha - |\beta|) = \theta(\beta + \alpha) - \theta(\beta - \alpha) \quad (\text{D.4})$$

läßt sich  $a_j(x)$  für  $j \in \mathbb{N}$  als

$$a_j(x) = \frac{V}{\pi} (I_j^+ - I_j^-) \quad (\text{D.5})$$

$$\begin{aligned}
 I_j^+ &:= \int_0^{2\pi} d\tau \, \theta(x+L-\lambda \cos \tau) \cos(j\tau) \\
 I_j^- &:= \int_0^{2\pi} d\tau \, \theta(x-L-\lambda \cos \tau) \cos(j\tau) = I_j^+(-L)
 \end{aligned} \tag{D.6}$$

schreiben. Es genügt also,  $I_j^+$  zu berechnen. Wegen der  $\theta$ -Funktion wird in  $I_j^+$  nur über Bereiche integriert, für die  $x+L > \lambda \cos \tau$  gilt. Es können drei verschiedene Fälle auftreten:

1.  $x+L \leq -\lambda \quad \Rightarrow \quad I_j^+ = 0,$
2.  $-\lambda < x+L < \lambda \quad \Rightarrow \quad I_j^+ = \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau \cos(j\tau),$
3.  $x+L \geq \lambda \quad \Rightarrow \quad I_j^+ = \int_0^{2\pi} d\tau \cos(j\tau) = 2\pi \delta_{j0}.$

Die Integrationsgrenzen im Fall 2 ergeben sich aus  $x+L = \lambda \cos \tau$  zu

$$\begin{aligned}
 \tau_1 &= \arccos\left(\frac{x+L}{\lambda}\right), \\
 \tau_2 &= 2\pi - \arccos\left(\frac{x+L}{\lambda}\right).
 \end{aligned}$$

Somit gilt in diesem Fall

$$\begin{aligned}
 I_0^+ &= 2\pi - 2 \arccos\left(\frac{x+L}{\lambda}\right) \\
 I_{j \geq 1}^+ &= \frac{1}{j} \left\{ \sin \left[ j \left( 2\pi - \arccos\left(\frac{x+L}{\lambda}\right) \right) \right] - \right. \\
 &\quad \left. \sin \left[ j \arccos\left(\frac{x+L}{\lambda}\right) \right] \right\}.
 \end{aligned}$$

Faßt man die drei obigen Fälle zusammen, so erhält man für  $j = 0$

$$I_0^+ = \theta(\lambda - |x+L|) \left\{ 2\pi - 2 \arccos\left(\frac{x+L}{\lambda}\right) \right\} + 2\pi \theta(x+L-\lambda), \tag{D.7}$$

und für  $j \geq 1$  ergibt sich mit

$$\sin \alpha - \sin \beta = 2 \cos\left(\frac{\alpha + \beta}{2}\right) \sin\left(\frac{\alpha - \beta}{2}\right)$$

die Relation

$$I_{j \geq 1}^+ = \theta(\lambda - |x + L|) \frac{2(-1)^j}{j} \sin \left[ j \left( \pi - \arccos \left( \frac{x + L}{\lambda} \right) \right) \right]. \quad (\text{D.8})$$

Mit Hilfe von  $\arccos(x) = \pi - \arccos(-x)$  und Gleichung (D.4) ergibt sich schließlich für  $j = 0$

$$\begin{aligned} I_0^+ - I_0^- &= 2\pi \theta(L + \lambda - |x|) \\ &\quad - 2\theta(\lambda - |L + x|) \arccos \left( \frac{L + x}{\lambda} \right) \\ &\quad - 2\theta(\lambda - |L - x|) \arccos \left( \frac{L - x}{\lambda} \right). \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Für das zeitgemittelte Potential erhält man also mit Hilfe von Gleichung (D.3) und (D.5) den Ausdruck

$$\begin{aligned} \bar{V}(x) &= V \left\{ \theta(L + \lambda - |x|) \right. \\ &\quad - \frac{1}{\pi} \theta(\lambda - |L + x|) \arccos \left( \frac{L + x}{\lambda} \right) \\ &\quad \left. - \frac{1}{\pi} \theta(\lambda - |L - x|) \arccos \left( \frac{L - x}{\lambda} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

In dimensionslosen Größen ausgedrückt (ersetze  $(V, x, \lambda, L) \rightarrow (\bar{V}, \tilde{x}, \tilde{\lambda}, 1)$ , siehe Gleichung (2.5)) ergibt sich Gleichung (4.5).

Für  $j \geq 1$  ergibt sich mit Hilfe von Gleichung (D.5)

$$\begin{aligned} a_j(x) &= \frac{2V(-1)^j}{\pi j} \times \\ &\quad \left\{ \theta(\lambda - |x + L|) \frac{2(-1)^j}{j} \sin \left[ j \left( \pi - \arccos \left( \frac{x + L}{\lambda} \right) \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + \theta(\lambda - |x - L|) \frac{2(-1)^j}{j} \sin \left[ j \left( \pi - \arccos \left( \frac{x - L}{\lambda} \right) \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (\text{D.11})$$

Somit gilt für  $j \geq 1$

$$|a_j(x)| \sim \frac{1}{j}. \quad (\text{D.12})$$

Entwickelt man  $V(x, t)$  gemäß

$$V(x, t) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_m(x) e^{im\omega t},$$

so gilt  $c_{\pm|m|}(x) = [a_{j=|m|}(x) \mp ib_{j=|m|}(x)]/2$  für  $m \neq 0$ , woraus

$$|c_m(x)| \sim \frac{1}{|m|}$$

unmittelbar folgt. Da der Hamiltonoperator in der Darstellung des lateral oszillierenden Potentials (siehe Abschnitt 2.2.6, Seite 60 ff.) keine zeitabhängigen Terme in der kinetischen Energie enthält, gilt mit

$$H(x, t) = \sum_m H^{(m)} e^{im\omega t}$$

für  $m \neq 0$

$$H^{(m)}(x) = c_m(x) \implies \|H^{(m)}(x)\| \sim \frac{1}{|m|}. \quad (\text{D.13})$$

## Anhang E

# Analytische Abschätzung der Verteilung der Aufenthaltszeiten im Rechtecktopf mit oszillierendem Boden

Es wird die Bewegung eines Massenpunktes der Masse 1 im Potential

$$\tilde{V}(\tilde{x}, \tau) = (\tilde{V}_0 + \tilde{V}_1 \cos \tau) \theta(1 - |\tilde{x}|) \quad (\text{E.1})$$

betrachtet. Teilchen, die mit dem Impuls

$$\tilde{p}_l = \frac{2}{2\pi l} = \frac{1}{l\pi}, \quad l = 1, 2, \dots, l_{\max} \quad (\text{E.2})$$

innerhalb des Rechtecktopfes starten, können diesen nicht verlassen, falls die Gesamtenergie des Teilchens beim Auftreffen auf eine der Topfwände negativ ist. Für anziehende Potentiale mit  $0 < \tilde{V}_1 < |\tilde{V}_0|$  gilt  $\tilde{p}_l^2/2 - |\tilde{V}_0| + \tilde{V}_1 \geq 0$  für  $l = 1, 2, \dots, l_{\max}$  mit

$$l_{\max} = \text{int} \left( \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{2(|\tilde{V}_0| - \tilde{V}_1)}} \right) < \infty.$$

Sei nun

$$\tilde{p}_\epsilon = \frac{\tilde{p}_l}{1 - \epsilon}. \quad (\text{E.3})$$

Dabei sei  $\epsilon$  so gewählt, daß alle Teilchen, die innerhalb des Topfes mit dem Impuls  $\tilde{p}_\epsilon$  zu derselben Phasenlage wie die Teilchen starten, die die  $l$ -te Resonanzbedingung (E.2) erfüllen, gerade noch mindestens einmal reflektiert werden, bevor sie den Potentialtopf verlassen. Die Flugzeit eines solchen Teilchens von einer Wand des Topfes zur anderen beträgt

$$\tau_{\tilde{p}_\epsilon} = \frac{2}{\tilde{p}_\epsilon} = 2\pi l(1 - \epsilon). \quad (\text{E.4})$$

Das Zeitfenster, um das die Anfangszeit einer Bahn mit Impuls  $\tilde{p}_\epsilon$  verschoben werden kann, so daß das Teilchen immer noch mindestens einmal reflektiert wird, ist durch

$$\delta\tau = \tau_{\tilde{p}_l} - \tau_{\tilde{p}_\epsilon} = 2\pi l - 2\pi l(1 - \epsilon) = 2\pi l\epsilon \quad (\text{E.5})$$

gegeben. Im Mittel über alle Anfangszeiten zwischen 0 und  $2\pi$  beträgt der Anteil der Bahnen mit Impuls  $\tilde{p}_\epsilon$ , die mindestens einmal reflektiert werden,

$$\delta_{\tilde{p}_\epsilon} = \frac{\delta\tau}{2\pi} = \epsilon l. \quad (\text{E.6})$$

Die Anzahl der Reflexionen, die eine Bahn mit Impuls  $\tilde{p}_\epsilon$ , gestartet in derselben Phasenlage wie die zur  $l$ -ten Resonanzbedingung gehörende Bahn mit Impuls  $\tilde{p}_l$ , bis zum Verlassen des Potentialtopfes ausführt, kann näherungsweise mit

$$\begin{aligned} N &= \frac{\text{Periode}}{\text{zeitliches Auseinanderlaufen pro Periode}} \\ &= \frac{T}{\delta\tau} = \frac{1}{\epsilon l} \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

angegeben werden. Damit ist die Aufenthaltszeit  $\tau_\epsilon$  eines Teilchen mit dem Anfangsimpuls  $\tilde{p}_\epsilon$  näherungsweise durch

$$\tau_\epsilon = N \cdot \tau_{\tilde{p}_\epsilon} \quad (\text{E.8})$$

gegeben. Somit läßt sich der Beitrag aller Bahnen mit Anfangsimpuls  $\tilde{p}_\epsilon$  zu der Verteilung  $P(\tau)$  der Aufenthaltszeiten  $\tau$  mit

$$P(\epsilon; \tau) d\epsilon = \delta_{\tilde{p}_\epsilon} \frac{1}{\delta\tau} \theta\left(\frac{\delta\tau}{2} - |\tau - \tau_\epsilon|\right) P(\epsilon) d\epsilon \quad (\text{E.9})$$



angeben, wobei  $P(\epsilon)$  die Verteilung der  $\epsilon$  bezeichnet.

Für lange Aufenthaltszeiten  $\tau$  ist eine große Anzahl von Reflexionen unerlässlich. Aus  $N = 1/(\epsilon l)$  und  $l \leq l_{\max} < \infty$  folgt  $\epsilon \ll 1$ . Aus diesem Grund ist auch die Breite  $\delta\tau$  der  $\theta$ -Funktion in Gleichung (E.9) klein, so daß näherungsweise gilt

$$\frac{1}{\delta\tau} \theta\left(\frac{\delta\tau}{2} - |\tau - \tau_\epsilon|\right) \approx \delta(\tau - \tau_\epsilon) = \delta\left(\tau - 2\pi\left(\frac{1}{\epsilon} - 1\right)\right). \quad (\text{E.10})$$

Somit tragen zu  $P(\epsilon; \tau)$  nur Aufenthaltszeiten

$$\tau = 2\pi\left(\frac{1}{\epsilon} - 1\right) \approx 2\pi\frac{1}{\epsilon}$$

bei. Der Zusammenhang zwischen  $\epsilon$  und  $\tau$  lautet also  $\epsilon = 2\pi/\tau$ .

Insgesamt ergibt sich der Beitrag der  $l$ -ten Resonanz zur Verteilung der Aufenthaltszeiten zu

$$\begin{aligned} P_{\tilde{p}_l}(\tau) &= \int_0^\infty d\epsilon P(\epsilon; \tau) \\ &= \int_0^\infty d\epsilon \delta_{\tilde{p}_\epsilon} \delta\left(\tau - 2\pi\frac{1}{\epsilon}\right) P(\epsilon). \end{aligned}$$

Aus  $P(\epsilon) = |d\tilde{p}_l/d\epsilon| P(\tilde{p}_l)$  folgt mit  $\tilde{p}_l = (1 - \epsilon)\tilde{p}_\epsilon$  und  $\tilde{p}_\epsilon \approx \tilde{p}_l$  die Relation  $P(\epsilon) = \tilde{p}_l P(\tilde{p}_l)$ . Unter Benutzung von  $\delta(\tau - 2\pi/\epsilon) = 2\pi/\tau^2 \delta(\epsilon - 2\pi/\tau)$  erhält man nun

$$\begin{aligned} P_{\tilde{p}_l}(\tau) &= \int_0^\infty d\epsilon \epsilon l \frac{2\pi}{\tau^2} \delta\left(\epsilon - \frac{2\pi}{\tau}\right) \tilde{p}_l P(\tilde{p}_l) \\ &= l \tilde{p}_l P(\tilde{p}_l) \frac{(2\pi)^2}{\tau^3}. \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

Für große Aufenthaltszeiten  $\tau$  und damit kleine  $\epsilon$  sind die Beiträge der  $\tilde{p}_\epsilon$  zu den verschiedenen  $\tilde{p}_l$  mit  $l = 1, 2, \dots, l_{\max} < \infty$  voneinander isoliert. Daher gilt  $P(\tau) \propto \sum_{l=1}^{l_{\max}} P(\tilde{p}_l)$ . Damit folgt schließlich auch Gleichung (3.10),

$$P(\tau) \propto \frac{1}{\tau^3}.$$

# Anhang F

## Herleitung der Bewegungsgleichungen des lateral oszillierenden Rechtecktopfs

Die diskreten Bewegungsgleichungen, die die Streuung eines Teilchens am durch Gleichung (4.2), Seite 98, bestimmten lateral oszillierenden Rechtecktopf beschreiben, lassen sich wie folgt formulieren: Der Ort, an dem das Teilchen zum  $n$ -ten Mal in Kontakt mit einer der beiden Unstetigkeiten des Potentials kommt, werde mit  $\tilde{x}_n$  bezeichnet. Der Zeitpunkt dieser Kollision sei  $\tau_n$ , und der Impuls kurz nach der  $n$ -ten Kollision sei durch  $\tilde{p}_n$  gegeben. Die Hilfsvariable *innerhalb<sub>n</sub>*, die die Werte *wahr* und *falsch* annehmen kann, soll schließlich angeben, ob sich das Teilchen kurz nach der Kollision innerhalb oder außerhalb des Rechtecktopfes befindet. Die Berechnung von  $\tilde{x}_{n+1}$ ,  $\tilde{p}_{n+1}$ ,  $\tau_{n+1}$  und *innerhalb<sub>n+1</sub>* läßt sich in drei Schritten vollziehen. Zunächst wird  $\tau_{n+1}$  bestimmt. Damit läßt sich  $\tilde{x}_{n+1}$  berechnen und schließlich werden  $\tilde{p}_{n+1}$  und *innerhalb<sub>n+1</sub>* bestimmt.

*Berechnung von  $\tau_{n+1}$ :* Es seien

$$\begin{aligned} F_{\tilde{x}_n, \tilde{p}_n, \tau_n}^L(\tau) &:= \tilde{x}_n + \tilde{p}_n (\tau - \tau_n) + 1 - \tilde{\lambda} \cos \tau, \\ F_{\tilde{x}_n, \tilde{p}_n, \tau_n}^R(\tau) &:= \tilde{x}_n + \tilde{p}_n (\tau - \tau_n) - 1 - \tilde{\lambda} \cos \tau. \end{aligned}$$

Die Nullstellen der Funktionen  $F^L$  und  $F^R$  liefern diejenigen Zeitpunkte, zu denen ein sich mit dem Impuls  $\tilde{p}_n$  frei bewegendes Teilchen auf den linken

bzw. rechten Topfrand trifft. Die möglichen Kandidaten für  $\tau_{n+1}$  ergeben sich also aus

$$\begin{aligned} F_{\tilde{x}_n, \tilde{p}_n, \tau_n}^L(\tau_{n+1}^L) &\stackrel{!}{=} 0, \\ F_{\tilde{x}_n, \tilde{p}_n, \tau_n}^R(\tau_{n+1}^R) &\stackrel{!}{=} 0. \end{aligned}$$

Der gesuchte Zeitpunkt  $\tau_{n+1}$  ergibt sich schließlich aus

$$\tau_{n+1} = \min \{ \tau_{n+1}^L, \tau_{n+1}^R \} > \tau_n. \quad (\text{F.1})$$

Die Nullstellen  $\tau_{n+1}^L$  und  $\tau_{n+1}^R$  lassen sich analytisch nicht in geschlossener Form angeben und müssen numerisch bestimmt werden. Läßt sich die Ungleichung  $\min \{ \tau_{n+1}^L, \tau_{n+1}^R \} > \tau_n$  nicht erfüllen, so kann das Teilchen keine der beiden Unstetigkeiten des Potentials mehr erreichen und ist frei. Der Impuls des freien, auslaufenden Teilchens ist in diesem Fall durch  $\tilde{p}_n$  gegeben.  
*Berechnung von  $\tilde{x}_{n+1}$ :* Der linke bzw. rechte Rand des Rechtecktopfes wird durch

$$\begin{aligned} X^L(\tau) &:= -1 + \tilde{\lambda} \cos \tau, \\ X^R(\tau) &:= 1 + \tilde{\lambda} \cos \tau, \end{aligned}$$

beschrieben. Somit ergibt sich der gesuchte Ort zu

$$\tilde{x}_{n+1} = X^\alpha(\tau_{n+1}) \quad \text{mit } \alpha = \begin{cases} L & \text{falls } \tau_{n+1} = \tau_{n+1}^L, \\ R & \text{falls } \tau_{n+1} = \tau_{n+1}^R. \end{cases} \quad (\text{F.2})$$

*Berechnung von  $\tilde{p}_{n+1}$  und  $innerhalb_{n+1}$ :* Es sind vier verschiedene Fälle in Abhängigkeit von  $innerhalb_n$  und der kinetischen Energie des Teilchens, gemessen in einem mit dem lateral oszillierenden Rechtecktopf mitbewegten Bezugssystem, möglich. Die Geschwindigkeit des Rechtecktopfes werde mit

$$\tilde{v}(\tau) := -\tilde{\lambda} \sin \tau$$

bezeichnet und  $E'_{\text{kin}}(\tilde{p})$  sei die kinetische Energie des Teilchens im mitbewegten Bezugssystem.

1. Fall:  $innerhalb_n = \text{falsch}$  und  $E'_{\text{kin}}(\tilde{p}_n) = \frac{1}{2}(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))^2 < \tilde{V}$ : Reflexion,

$$\tilde{p}_{n+1} = 2\tilde{v}(\tau_{n+1}) - \tilde{p}_n, \quad (\text{F.3})$$

$$innerhalb_{n+1} = \text{falsch}. \quad (\text{F.4})$$

2. Fall:  $innerhalb_n = falsch$  und  $E'_{kin}(\tilde{p}_n) = \frac{1}{2}(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))^2 > \tilde{V}$ : Transmission,

$$\tilde{p}_{n+1} = \tilde{v}(\tau_{n+1}) + \frac{(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))}{|\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1})|} \sqrt{(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))^2 - 2\tilde{V}}, \quad (F.5)$$

$$innerhalb_{n+1} = wahr. \quad (F.6)$$

3. Fall:  $innerhalb_n = wahr$  und  $E'_{kin}(\tilde{p}_n) + \tilde{V} = \frac{1}{2}(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))^2 + \tilde{V} < 0$ : Reflexion,

$$\tilde{p}_{n+1} = 2\tilde{v}(\tau_{n+1}) - \tilde{p}_n, \quad (F.7)$$

$$innerhalb_{n+1} = wahr. \quad (F.8)$$

4. Fall:  $innerhalb_n = wahr$  und  $E'_{kin}(\tilde{p}_n) + \tilde{V} = \frac{1}{2}(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))^2 + \tilde{V} > 0$ : Transmission,

$$\tilde{p}_{n+1} = \tilde{v}(\tau_{n+1}) + \frac{(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))}{|\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1})|} \sqrt{(\tilde{p}_n - \tilde{v}(\tau_{n+1}))^2 + 2\tilde{V}}, \quad (F.9)$$

$$innerhalb_{n+1} = falsch. \quad (F.10)$$

Die Anfangsbedingungen für Streubahnen seien schließlich durch  $|\tilde{x}_0| = 1 + \tilde{\lambda}$ ,  $|\tilde{p}_0| > 0$  mit  $\tilde{x}_0 \cdot \tilde{p}_0 < 0$  sowie  $innerhalb_0 = falsch$  und  $\tau_0 \in [0, 2\pi)$  gegeben. Dabei tritt das mit dem Impuls  $\tilde{p}_0$  einlaufende Teilchen am Ort  $\tilde{x}_0$  zum Zeitpunkt  $\tau_0$  in den Wechselwirkungsbereich ein.

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Skizze der Kramers-Henneberger-Transformation . . . . .	22
2.2	Schematische Darstellung der Messung der Transporteigen- schaften eines mesoskopischen Systems . . . . .	28
2.3	Eindimensionales zeitperiodisches Streusystem . . . . .	44
2.4	Resonanzen im effektiven Potential . . . . .	45
2.5	Schematische Darstellung der Wellenpaketpropagation . . . . .	61
3.1	Rechtecktopf mit oszillierendem Boden . . . . .	66
3.2	Phasenraumplot Rechtecktopf mit osz. Boden für $\tilde{V}_1 \ll  \tilde{V}_0 $ . . . . .	72
3.3	Ablenkfunktion Rechtecktopf mit osz. Boden für $\tilde{V}_1 \ll  \tilde{V}_0 $ . . . . .	73
3.4	Phasenraumplot Rechtecktopf mit osz. Boden für $\tilde{V}_1 \lesssim  \tilde{V}_0 $ . . . . .	73
3.5	Ablenkfunktion Rechtecktopf mit osz. Boden für $\tilde{V}_1 \lesssim  \tilde{V}_0 $ . . . . .	74
3.6	Aufenthaltszeitverteilung im Rechtecktopf mit osz. Boden . . . . .	75
3.7	Totale Transmission im Rechtecktopf mit osz. Boden . . . . .	77
3.8	$T_0(E)$ im Rechtecktopf mit osz. Boden . . . . .	78
3.9	$T_1(E)$ im Rechtecktopf mit osz. Boden . . . . .	79
3.10	Effektive Aufenthaltszeit im Rechtecktopf mit osz. Boden . . . . .	80
3.11	$W(E, V_1)$ im Rechtecktopf mit osz. Boden . . . . .	81
3.12	Resonanzen in der $\omega$ - $E$ -Ebene im Rechtecktopf mit osz. Boden . . . . .	82
3.13	Oszillierendes $1/\cosh^2$ -Potential . . . . .	83
3.14	Phasenraumplot $1/\cosh^2$ -Potential für $\tilde{V}_1 \ll  \tilde{V}_0  = 0.4$ . . . . .	85
3.15	Stabilitätsinsel im $1/\cosh^2$ -Potential für $\tilde{V}_1 \ll  \tilde{V}_0  = 0.4$ . . . . .	86
3.16	Ablenkfunktion $1/\cosh^2$ -Potential für $\tilde{V}_1 \ll  \tilde{V}_0  = 0.4$ . . . . .	86
3.17	Phasenraumplot $1/\cosh^2$ -Potential für $\tilde{V}_1 =  \tilde{V}_0  = 0.4$ . . . . .	87
3.18	Stabilitätsinsel im $1/\cosh^2$ -Potential für $\tilde{V}_1 =  \tilde{V}_0  = 0.4$ . . . . .	88
3.19	Ablenkfunktion $1/\cosh^2$ -Potential für $\tilde{V}_1 =  \tilde{V}_0  = 0.4$ . . . . .	88
3.20	Phasenraumplot $1/\cosh^2$ -Potential für $\tilde{V}_1 =  \tilde{V}_0  = 5$ . . . . .	89
3.21	Aufenthaltszeitverteilung im $1/\cosh^2$ -Potential . . . . .	90
3.22	Totale Transmission im $1/\cosh^2$ -Potential . . . . .	92

3.23	$T_0(E)$ im $1/\cosh^2$ -Potential	93
3.24	$T_1(E)$ im $1/\cosh^2$ -Potential	94
3.25	Effektive Aufenthaltszeit im $1/\cosh^2$ -Potential	95
3.26	$W(E, V_1)$ im $1/\cosh^2$ -Potential	95
4.1	Phasenraumplot lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -0.75, \tilde{\lambda} = 0.1$	101
4.2	Ablenkfunktion lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -0.75, \tilde{\lambda} = 0.1$	102
4.3	Aufenthaltszeitverteilung im lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -0.75, \tilde{\lambda} = 0.1$	102
4.4	Phasenraumplot lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -0.04, \tilde{\lambda} = 1.6$	103
4.5	Ablenkfunktion lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -0.04, \tilde{\lambda} = 1.6$	104
4.6	Aufenthaltszeitverteilung im lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -0.04, \tilde{\lambda} = 1.6$	104
4.7	Zeitmittel des lateral oszillierenden Rechteckpotentials	106
4.8	Phasenraumplot lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}, \tilde{\lambda} = 1.6$	107
4.9	Ablenkfunktion lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}, \tilde{\lambda} = 1.6$	107
4.10	Aufenthaltszeitverteilung im lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -4 \cdot 10^{-5}, \tilde{\lambda} = 1.6$	108
4.11	Effektive Aufenthaltszeit im lat. osz. Rechtecktopf für verschiedene $\omega$	111
4.12	Effektive Aufenthaltszeit im lat. osz. Rechtecktopf für verschiedene $\lambda$	113
4.13	Dynamisches Tunneln im diabatischen Grenzfall	114
4.14	Dynamischer Tunneleffekt: Oszillationen des Resonanzwellenpakets	115
4.15	Husimidichte im lat. osz. Rechtecktopf für $\lambda > L$	120
4.16	Husimidichte im lat. osz. Rechtecktopf für $\lambda < L$	122
4.17	Zeitintegrierter Phasenraumplot lat. osz. Rechtecktopf: $\tilde{V} = -0.75, \tilde{\lambda} = 0.1$	123
4.18	Potential des Quantendots	124
4.19	Resonantes Tunneln durch einen Quantendot	125
4.20	$T_{\text{tot}}(E)$ und $W(E)$ im lat. osz. Quantendot	127
4.21	$W(E)$ im lat. osz. Quantendot	128
A.1	Skizze des Tien-Gordon-Modells	135

# Literaturverzeichnis

- [1] M. Grifoni und P. Hänggi, Phys. Rep. **304**, 229 (1998)
- [2] P. Hänggi in *Quantum Transport and Dissipation*, eds. T. Dittrich, P. Hänggi, G.L. Ingold, B. Kramer, G. Schön und W. Zwerger, Wiley-VCH (Weinheim, 1998)
- [3] R. Landauer, Philos. Mag. **21**, 863 (1970)
- [4] M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **57**, 1761 (1986)
- [5] W. Zwerger in *Quantum Transport and Dissipation*, eds. T. Dittrich, P. Hänggi, G.L. Ingold, B. Kramer, G. Schön und W. Zwerger, Wiley-VCH (Weinheim, 1998)
- [6] H. U. Baranger und A.D. Stone, Phys. Rev. B **40**, 8169 (1989)
- [7] D.S. Fisher und P.A. Lee, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981)
- [8] M. Büttiker, A. Prêtre und H. Thomas, Phys. Rev. Lett. **70**, 4114 (1993)
- [9] A. Prêtre, H. Thomas und M. Büttiker, Phys. Rev. B **54**, 8130 (1996)
- [10] M. Büttiker und T. Christen in *Mesoscopic Electron Transport*, eds. L.L. Sohn, L.P. Kouwenhoven und G. Schön, NATO ASI Series E: Applied Sciences - Vol. 345, Kluwer Academic Publishers (Dordrecht, 1997), Seite 259 ff.
- [11] M.H. Pedersen und M. Büttiker, Phys. Rev. B **58**, 12993 (1998)
- [12] M. Büttiker, J. Phys.: Condensed Matter **5**, 9361 (1993)

- [13] D.H. Dunlap und V.M. Kenkre, Phys. Rev. B **34**, 3625 (1986)
- [14] G. Cuniberti, M. Sassetti und B. Kramer, Physica B **227**, 256 (1996)
- [15] G. Cuniberti, M. Sassetti und B. Kramer, Phys. Rev. B **57**, 1515 (1998)
- [16] Y.M. Blanter und M. Büttiker, Europhys. Lett. **42**, 535 (1998)
- [17] Y.M. Blanter, F.W.J. Hekking und M. Büttiker, Phys. Rev. Lett. **81**, 1925 (1998)
- [18] T. Brandes, Phys. Rev. B **56**, 1213 (1997)
- [19] T. Brandes, Ann. Physik **7**, 120 (1998)
- [20] A.P. Jauho, preprint *cond-mat/9711141* (1997)
- [21] T. Brandes, Europhys. Lett. **33**, 629 (1996)
- [22] B. Kramer ed., *Quantum Transport in Semiconductor Submicron Structures*, NATO ASI Series E: Applied Sciences - Vol. 326, Kluwer Academic Publishers (Dordrecht, 1996)
- [23] D. K. Ferry, H. L. Grubin, C. Jacoboni und A.-P. Jauho eds., *Quantum Transport in Ultrasmall Devices*, NATO ASI Series B: Applied Sciences - Vol. 342, Plenum Press (New York, 1995)
- [24] für einen modernen Review über *Photon-assisted-tunneling* siehe z. B.: T.H. Oosterkamp, W.G. van der Wiel, S. De Franceschi, C.J.P.M. Harman und L.P. Kouwenhoven, preprint *cond-mat/9904359* (1999)
- [25] L.P. Kouwenhoven, S. Jauhar, J. Orenstein, P.L. McEuen, Y. Nagamune, J. Motohisa und H. Sakaki, Phys. Rev. Lett. **73**, 3443 (1994)
- [26] L.P. Kouwenhoven, S. Jauhar, K. McCormick, D. Dixon, P.L. McEuen, Y.V. Nazarov, N.C. van der Vaart und C.T. Foxon, Phys. Rev. B **50**, 2019 (1994)
- [27] R.H. Blick, R.J. Haug, D.W. van der Weide, K. von Klitzing und K. Eberl, Appl. Phys. Lett. **67**, 3924 (1995)



- [28] L.P. Kouwenhoven, N.C. van der Vaart, Y.V. Nazarov, S. Jauhar, D. Dixon, K. McCormick, P.L. McEuen, Y. Nagamune, J. Motohisa und H. Sakaki, *Surf. Sci.* **361/362**, 591 (1996)
- [29] K. Fujii, W. Gödel, D.A. Wharam, S. Manus, J.P. Kotthaus, G. Böhm, W. Klein, G. Tränkle und G. Weimann, *Physica B* **227**, 98 (1996)
- [30] T.H. Osterkamp, L.P. Kouwenhoven, A.E.A. Koolen, N.C. van der Vaart und C.J.P.M. Harmans, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1536 (1997)
- [31] P.S.S. Guimarães, B.J. Kaey, J.P. Kaminsky, S.J. Allen Jr., P.F. Hopkins, A.C. Gossard, L.T. Florez und J.P. Harbison, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3792 (1993)
- [32] B.J. Keay, S.J. Allen Jr., J. Galán, J.P. Kaminsky, K.L. Campman, A.C. Gossard, U. Bhattcharya und M.J.W. Rodwell, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4098 (1995)
- [33] B.J. Keay, S. Zeuner, S.J. Allen Jr., K.D. Maranowski, A.C. Gossard, U. Bhattcharya und M.J.W. Rodwell, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4102 (1995)
- [34] S.J. Allen, U. Bhattcharya, K. Campman, H. Drexler, A. Gossard, B.J. Keay, K. Maranowski, G. Medeiros-Ribeiro, M. Rodwell, J.S. Scott, C. Unterrainer, M. Wanke und S. Zeuner, *Physica B* **227**, 367 (1996)
- [35] R.H. Blick, R.J. Haug, K. von Klitzing und K. Eberl, *Surf. Sci.* **361/362**, 595 (1996)
- [36] R.H. Blick, D.W. van der Weide, R.J. Haug und K. Eberl, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 689 (1998)
- [37] T.H. Osterkamp, T. Fujisawa, W.G. van der Wiel, K. Ishibashi, R.V. Hijman, s. Tarucha und L.P. Kouwenhoven, *Nature* **395**, 873 (1998)
- [38] A.H. Dayem und R.J. Martin, *Phys. Rev. Lett.* **8**, 246 (1962)
- [39] P.K. Tien und J.P. Gordon, *Phys. Rev.* **129**, 647 (1963)
- [40] J.R. Tucker und M.J. Feldman, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 1055 (1985)

- [41] H.C. Liu, Appl. Phys. Lett. **52**, 453 (1988)
- [42] D. Sokolovski, Phys. Rev. B **37**, 4201 (1988)
- [43] D. Sokolovski, J. Phys. C: Solid State Phys. **21**, 639 (1988)
- [44] S. Feng und Q. Hu, Phys. Rev. B **48**, 5354 (1993)
- [45] K. Yakubo, S. Feng und Q. Hu, Phys. Rev. B **54**, 7987 (1996)
- [46] M. Wagner und H. Mizuta, Phys. Rev. B **48**, 14393 (1993)
- [47] P. Brune, C.Bruder und H.Schoeller, Physica E **1**, 216 (1997)
- [48] C.A. Stafford und N.S. Wingreen, Phys. Rev. Lett. **76**, 1916 (1996)
- [49] R. Blümel und W.P. Reinhardt, *Chaos in Atomic Physics*, Cambridge University Press (Cambridge, 1997)
- [50] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical an Quantum Mechanics*, Springer-Verlag (New York, 1990)
- [51] J.E. Bayfield und P.M. Koch, Phys. Rev. Lett. **33**, 258 (1974)
- [52] J. Broeckhove und L. Lathouwers eds., *Time-Dependent Quantum Molecular Dynamics*, NATO ASI Series B: Applied Sciences - Vol. 299, Plenum Press (New York, 1992)
- [53] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Revised Edition, Addison-Wesley (Reading, 1994)
- [54] R.G. Newton, *Scattering Thteory of Waves and Particles* (2nd ed.), Springer (New York, 1982)
- [55] J.S. Howland, Ind. Univ. Math. J. **28**, 471 (1979)
- [56] F. Borgonovi und I. Guarneri, J. Phys. A: Math. Gen. **25**, 3239 (1992)
- [57] U. Peskin und N. Moiseyev, Phys. Rev. A **49**, 3712 (1994)
- [58] D.S. Saraga und M. Sassoli de Bianchi, Helv. Phys. Acta **70**, 751 (1997)
- [59] P.A. Martin und M. Sassoli de Bianchi, J. Phys. A: Math. Gen. **28**, 2403 (1995)

- [60] T. Kovar und P.A. Martin, J. Phys. A: Math. Gen. **31**, 385 (1998)
- [61] A.K. Kazanskii, V.N. Ostrovskii und E.A. Solov'ev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **70**, 493 (1976)
- [62] A.D. Stone, M.Y. Azbel und P.A. Lee, Phys. Rev. B **31**, 1707 (1985)
- [63] P.F. Bagwell und R.K. Lake, Phys. Rev. B **46**, 15329 (1992)
- [64] R.A. Sachs und Szöke, Phys. Rev. A **40**, 5614 (1989)
- [65] J.Z. Kamiński, Z. Phys. D - Atoms, Molecules and Clusters **16**, 153 (1990)
- [66] J.D. White und M. Wagner, Phys. Rev. B **48**, 2799 (1993)
- [67] M. Wagner, Phys. Rev. B **49**, 16544 (1994)
- [68] M. Wagner, Phys. Rev. A **51**, 798 (1995)
- [69] M. Wagner und W. Zwerger, Phys. Rev. B **55**, R10217 (1997)
- [70] G. Burmeister und K. Maschke, Phys. Rev. B **57**, 13050 (1998)
- [71] G. Burmeister und K. Maschke, Phys. Rev. B **59**, 4612 (1999)
- [72] J.A. Støvneng und E.H. Hauge, J. Stat. Phys. **57**, 841 (1989)
- [73] I. Vorobeichik, R. Lefebvre und N. Moiseyev, Europhys. Lett. **41**, 111 (1998)
- [74] I. Vorobeichik und N. Moiseyev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **31**, 645 (1998)
- [75] J.Z. Kamiński und F. Ehlotzky, Phys. Rev. A **50**, 4404 (1994)
- [76] J.Z. Kamiński, A. Jaroń und F. Ehlotzky, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. **28**, 4895 (1995)
- [77] H.A. Kramers, *Collected Scientific Papers*, North-Holland (Amsterdam, 1956), p. 272; W.C. Henneberger, Phys. Rev. Lett. **21**, 838 (1958)

- [78] A.J. Lichtenberg und M.A. Lieberman, *Regular and Chaotic Dynamics* (2nd ed.), Applied Mathematical Sciences, vol. 38, Springer (New York, 1992)
- [79] L.E. Reichl, *The Transition to Chaos*, Institute for Nonlinear Science, Springer (New York, 1992)
- [80] F. Borgonovi und I. Guarneri in *Quantum Chaos – Quantum Measurement*, P. Cvitanović et. al. eds., Kluwer Academic Press (Dordrecht, 1992)
- [81] P. Šeba, Phys. Rev. E **47**, 3870 (1993)
- [82] P. Šeba und P. Gerwinsky, Phys. Rev. E **50**, 3615 (1994)
- [83] J.H. Jensen, Phys. Rev. Lett. **73**, 244 (1994)
- [84] P. Eckelt und E. Zienicke, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 153 (1991)
- [85] A.J. Fendrik und D.A. Wisniacki, Phys. Rev. E **55**, 6507 (1997)
- [86] R.V. Jensen, S.M. Susskind und M.M. Sanders, Phys. Rep. **201**, 1 (1991)
- [87] L. Wiesenfeld, Phys. Lett. **144A**, 467 (1990)
- [88] L. Wiesenfeld, J. Phys. B: Mol. Opt. Phys. **25**, 4373 (1992)
- [89] Y.C. Lai, C. Grebogi, R. Blümel und M. Ding, Phys. Rev. A **45**, 8284 (1992)
- [90] L. Jie, C. Shi-Gang und B. Hu, Acta Phys. Sin. - ov. ed. **7**, 89 (1998)
- [91] G. Casati, B.V. Chirikov, I. Guarneri und D.L. Shepelyansky, Phys. Rep. **154**, 77 (1989)
- [92] F. Borgonovi und I. Guarneri, Phys. Rev. E **48**, R2347 (1993)
- [93] U. Peskin und N. Moiseyev, J. Chem. Phys. **99**, 4590 (1993)
- [94] M.D. Feit, J.J.A. Fleck und A. Steiger, J. Comput. Phys. **47**, 412 (1982)
- [95] für einen modernen Review über *komplexe Rotation* siehe z. B.: N. Moiseyev, Phys. Rep. **302**, 211 (1998)

- [96] C. Jung und T.H. Seligman, Phys. Rep. **285**, 77 (1997)
- [97] U. Smilansky in *Chaos and Quantum Physics*, eds. M. J. Giannoni, A. Voros und J. Zinn-Justin, Les Houches, Session *LII*, 1989, North-Holland (Amsterdam, 1991)
- [98] M. Tabor, *Chaos and integrability in nonlinear dynamics: an introduction*, John Wiley & Sons (New York, 1989), Seite 118 ff.
- [99] B. Eckhardt und C. Jung, J. Phys. A: Math. Gen. **19**, L829 (1986)
- [100] T. Tél, J. Phys. A: Math. Gen. **22**, L691 (1989)
- [101] Y.T. Lau, J.M. Finn und E. Ott, Phys. Rev. Lett. **66**, 978 (1991)
- [102] F.F. Karney, Physica **8D**, 360 (1983)
- [103] J.D. Meiss und E. Ott, Phys. Rev. Lett. **55**, 2741 (1985)
- [104] H.U. Baranger, R.A. Jalabert und A.D. Stone, Chaos **3**, 665 (1993)
- [105] O. Legrand und D. Sornette, Europhys. Lett. **11**, 583 (1990)
- [106] W. Bauer und G.F. Bentsch, Phys. Rev. Lett. **65**, 2213 (1990)
- [107] N. Moiseyev, J. Chem. Phys. **101**, 9716 (1994)
- [108] R. Blümel und U. Smilansky, Phys. Rev. Lett. **60**, 477 (1988)
- [109] T. Ericson, Phys. Rev. Lett. **5**, 430 (1960)
- [110] C.H. Lewenkopf und H.A. Weidenmüller, Ann. Phys. (NY) **212**, 53 (1991)
- [111] O. Bohigas, M.J. Giannoni und C. Schmit, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984)
- [112] M. V. Berry, Proc. Roy. Soc. Lon. A **400**, 229 (1985)
- [113] R. Blümel und U. Smilansky, Phys. Rev. Lett. **64**, 241 (1990)
- [114] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap. **12**, 570 (1957)

- [115] A. Galindo und P. Pascual, *Mecánica Cuántica II*, Eudema, (Madrid, 1989)
- [116] G. Floquet, Ann. de l'Ecole Norm. Sup. **12**, 47 (1883)
- [117] S.I. Chu, Adv. At. Mol. Phys. **21**, 197 (1985)
- [118] siehe z. B.: N.W. Ashcroft und N.D. Mermin, *Solid State Physics*, International Edition, Saunders College Publishing (Philadelphia, 1976)
- [119] A. Pimpale, S. Holloway und R.J. Smith, J. Phys. A: Math. Gen. **24**, 3533 (1991)
- [120] M. Wagner, Phys. Rev. Lett. **76**, 4010 (1996)
- [121] P. Pfeifer und R.D. Levine, J. Chem. Phys. **79**, 5512 (1983)
- [122] W.S. Truscott, Phys. Rev. Lett. **70**, 1900 (1993)
- [123] H. Friedrich, *Theoretical Atomic Physics*, Springer-Verlag (Berlin, 1990)
- [124] *NAG Fortran Library Mark 18*, NAG (1997)
- [125] L.D. Landau und E.M. Lifschitz, *Lehrbuch der theoretischen Physik: III Quantenmechanik*, Akademie-Verlag (Berlin, 1979), Seite 79
- [126] M. Gavrilă und J.Z. Kamiński, Phys. Rev. Lett. **52**, 613 (1984)
- [127] M. Pont, N.R. Walet und M. Gavrilă, Phys. Rev. A **41**, 477 (1990)
- [128] M. Pont, N.R. Walet, M. Gavrilă und C.W. McCurdy, Phys. Rev. Lett. **61**, 939 (1988)
- [129] B. Birnir, B. Galdrikian, R. Grauer und M. Sherwin, Phys. Rev. B **47**, 6795 (1993)
- [130] W. Chism, T. Timberlake und L.E. Reichl, Phys. Rev. E **58**, 1713 (1998)
- [131] B. Drossel und T. Prellberg, Eur. Phys. J. B **1**, 533 (1998)
- [132] M. Wagner, private Mitteilung

- [133] P. Šeba, private Mitteilung
- [134] M.J. Davis und E.J. Heller, J. Chem. Phys. **75**, 246 (1981)
- [135] F. Grossmann, T. Dittrich, P. Jung und P. Hänggi, Phys. Rev. Lett. **67**, 516 (1991)
- [136] P. Hawrylak und L. Rego, Physica E **3**, 198 (1998)
- [137] R. Courant, *Differential and Integral Calculus Vol II*, Wiley Classics Library (New York, 1988), Seite 71

# Danksagung

Zuallererst möchte ich mich bei meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. Peter Fulde für die Überlassung des Themas, die gewährte Freiheit und seine großzügige Unterstützung, die mir u.a. den Besuch diverser Tagungen in Israel, Großbritannien und Deutschland ermöglichte, herzlich bedanken.

Tiefen Dank schulde ich Herrn PD Dr. Klaus Richter und Herrn Prof. Dr. Thomas Dittrich für die Betreuung dieser Arbeit sowie für die zahlreichen Diskussionen und Anregungen und nicht zuletzt für die hervorragende Zusammenarbeit.

Herrn Dr. Mathias Wagner und Herrn Dr. Petr Šeba möchte ich für viele interessante und weiterbringende Diskussionen sowie eine sehr gute Zusammenarbeit danken. Herrn Dr. Petr Šeba bin ich zudem für meine Aufenthalte in Řež bei Prag zu Dank verpflichtet.

Natürlich möchte ich mich bei allen Mitgliedern der Nachwuchsgruppe *Quantenchaos und mesoskopische Systeme* des MPI für Physik komplexer Systeme in Dresden für die vielen interessanten Anregungen und Diskussionen sowie für die überaus angenehme Arbeitsatmosphäre bedanken. Insbesondere gilt mein Dank Frau Dipl.-Phys. Martina Hentschel für die Übernahme der undankbaren Aufgabe des Korrekturlesens dieser Arbeit.

Schließlich bin ich noch allen Mitarbeitern des MPI für Physik komplexer Systeme in Dresden für das angenehme und ausgeglichene Arbeitsklima zu Dank verpflichtet.

Persönlichen Dank schulde ich meinen Eltern, die mir das Studium ermöglicht haben und mir nicht zuletzt durch das Korrekturlesen dieser Arbeit sehr geholfen haben.



# Versicherung

Hiermit versichere ich, daß ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht. Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die vorliegende Doktorarbeit wurde unter der Betreuung von Prof. Dr. Peter Fulde, PD Dr. Klaus Richter und Prof. Dr. Thomas Dittrich am Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme in Dresden angefertigt.

Dresden, den 12. Mai 1999

